



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ



ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ

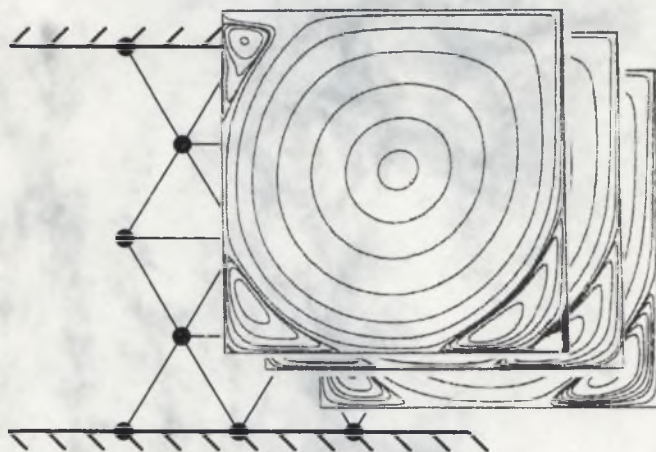
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΒΙΟΜΗΧΑΝΙΑΣ

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

με θέμα

Η Μέθοδος Lattice Boltzmann στην Υπολογιστική Ρευστομηχανική



Σταύρος Μ. Μαραγκουδάκης
Α.Μ. : 0596028/263

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ Δ. Βαλουγεώργης

Βόλος, 2002

*Αφιερώνεται στους γονείς μου,
Μιχάλη και Γαρυφαλλιά*



αρ. ελ.σ. 320 / Π.Α.....



ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Πρόλογος – Ευχαριστίες.....	3
Επεξήγηση Συμβόλων.....	5
Κεφάλαιο 1. – Εισαγωγή	
Γενική εποπτεία των μεθόδων Lattice Gas και Lattice Boltzmann	7
Κεφάλαιο 2. – Συνοπτική θεωρία της μεθόδου Lattice Boltzmann	
2.1 Εισαγωγή.....	16
2.2 Συνοπτική μαθηματική θεώρηση της LBM.....	17
2.3 Τα πλεγματικά μοντέλα HPP, FHP και το κυβικό πλέγμα 15 ταχυτήτων.....	25
Κεφάλαιο 3. – Αναλυτικές λύσεις των ροών Poiseuille & Couette	
3.1 Εισαγωγή.....	31
3.2 Αναλυτική λύση της ροής Poiseuille σε τριγωνικό πλέγμα (FHP model).....	32
3.3 Αναλυτική λύση της ροής Poiseuille σε τετραγωνικό πλέγμα (Square Lattice LBGK model).....	43
3.4 Αναλυτική λύση της ροής Couette σε τριγωνικό πλέγμα.....	51
3.5 Αναλυτική λύση της ροής Poiseuille σε τετραγωνικό πλέγμα	52
Κεφάλαιο 4. – Αριθμητικές λύσεις των ροών Poiseuille & Couette	
4.1 Εισαγωγή.....	57
4.2 Αριθμητικές λύσεις.....	58
4.2.1 Τετραγωνικό πλέγμα.....	58
4.2.1.1 Ροή Poiseuille.....	58
4.2.1.2 Ροή Couette.....	65
4.2.2 Τριγωνικό πλέγμα (ροές Poiseuille & Couette).....	68
4.3 Υλοποίηση συνοριακών συνθηκών με χρήση της συνθήκης bounce – back.....	69

Κεφάλαιο 5. – Διδιάστατη ροή σε κοιλότητα

5.1 Εισαγωγή.....	75
5.2 Περιγραφή του προβλήματος.....	76
5.3 Συγκρίσεις μεταξύ της μεθόδου LB και των συμβατικών μεθόδων.....	78
5.3.1 Ροϊκή συνάρτηση και ροϊκές γραμμές.....	78
5.3.2 Προφίλ ταχυτήτων.....	84
5.3.3 Πίεση.....	85
5.3.4 Οπισθέλκουσα.....	89
5.4 Ανάλυση σφαλμάτων.....	90
5.4.1 Πηγές σφαλμάτων.....	90
5.4.2 Σφάλμα ολοκλήρωσης.....	92
5.4.3 Σφάλμα συμπίεστικότητας.....	93
5.5 Συμπεράσματα.....	96

Κεφάλαιο 6. – Η Μέθοδος Lattice Boltzmann σε τρεις διαστάσεις

6.1 Εισαγωγή.....	99
6.2 Αναλυτική λύση της ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής.....	100
6.3 Αριθμητική λύση της ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής.....	101
6.3.1 Διατύπωση του προβλήματος – Υλοποίηση Συνορ. Συνθ.....	101
6.3.2 Αριθμητικά αποτελέσματα – Συμπεράσματα.....	104

Κεφάλαιο 7. – Συμπεράσματα – Προτάσεις.....

Βιβλιογραφία - Αναφορές.....	110
Παράρτημα.....	114

ΠΡΟΛΟΓΟΣ – ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Η μέθοδος Lattice – Boltzmann αποτελεί ένα εναλλακτικό και πολλά υποσχόμενο αριθμητικό σχήμα για την προσομοίωση προβλημάτων ροής και μοντελοποίηση της φυσικής των ρευστών. Σε αντίθεση με τα κλασσικά αριθμητικά σχήματα που βασίζονται στη διακριτοποίηση των μακροσκοπικών εξισώσεων διατήρησης μάζας, ορμής και ενέργειας, η μέθοδος Lattice – Boltzmann βασίζεται στην εξίσωση Boltzmann και σε απλοποιημένα κινητικά μοντέλα που περιγράφουν τη συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων. Επομένως, η λύση του προβλήματος δεν εξαρτάται από το μικρόκοσμο των σωματιδίων όπως συμβαίνει στην κλασσική προσομοίωση της δυναμικής των σωματιδίων. Η μέθοδος λειτουργεί σε μεσοσκοπικό επίπεδο, ενώ ο τελικός στόχος είναι ο υπολογισμός των μακροσκοπικών μεγεθών (ταχύτητα, πίεση, πυκνότητα κλπ). Ο κινητικός χαρακτήρας της μεθόδου Lattice – Boltzmann εισάγει μερικά ενδιαφέροντα χαρακτηριστικά, όπως για παράδειγμα ο όρος μεταφοράς είναι γραμμικός ενώ η πίεση υπολογίζεται από την καταστατική εξίσωση των αερίων. Η διακριτοποίηση στο πεδίο ταχυτήτων είναι πεπερασμένη, ενώ στην εξίσωση Boltzmann το πεδίο ταχυτήτων είναι πλήρες και συνεχές. Τα μακροσκοπικά μεγέθη προκύπτουν από τη συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων με απλούς αλγεβρικούς υπολογισμούς. Η μέθοδος εφαρμόζεται συνήθως σε διάφορα πλέγματα που χρησιμοποιούν καρτεσιανές συντεταγμένες, όπως τριγωνικό και τετραγωνικό (για 2D προβλήματα), κυβικό (για 3D προβλήματα), ωστόσο έχουν αναπτυχθεί και πλέγματα που χρησιμοποιούν πολικές και κυλινδρικές συντεταγμένες.

Όπως προαναφέρθηκε, το ενδιαφέρον για τη νέα αυτή μέθοδο είναι μεγάλο λόγω της απλότητάς της, λόγω του ότι είναι πλήρως παραλληλοποιήσιμη και λόγω των δυνατοτήτων της να επιλύει πολύπλοκα ροϊκά πεδία. Ένα τμήμα της γενικής προσπάθειας σχετίζεται με τη λεπτομερή ποσοτική ανάλυση της μεθόδου και την καθιέρωση ενός θεωρητικού υπόβαθρου. Είναι γνωστό στους χρήστες της μεθόδου ότι συχνά εγείρονται προβλήματα αστάθειας, ενώ η εφαρμογή κατάλληλων συνοριακών συνθηκών είναι υπό ανάπτυξη. Ένας σημαντικός αριθμός αναλυτικών λύσεων Lattice – Boltzmann έχει ήδη αναπτυχθεί για βασικές μονοδιάστατες ροές. Αναλυτικές λύσεις σε πιο πολύπλοκες ροές είναι αναγκαίες προκειμένου να βοηθήσουν συστηματικά στην έφεση γενικών κανόνων σε σχέση με την ευστάθεια και ακρίβεια που θα πρέπει να αναμένουμε από τη μέθοδο. Επιπλέον, η περαιτέρω απευθείας αριθμητική εφαρμογή της μεθόδου σε τρισδιάστατες ροές με πολύπλοκα

φυσικά όρια είναι εξίσου αναγκαία. Η μέθοδος ήδη εφαρμόζεται πιλοτικά σε προβλήματα προσομοίωσης κλασσικής ρευστομηχανικής, τύρβης, πολυφασικών ροών με σωματίδια, μεταφοράς θερμότητας και ροών με χημικές αντιδράσεις.

Στην παρούσα Διπλωματική Εργασία, έγινε η προσπάθεια παρουσίασης ενός βασικού θεωρητικού υπόβαθρου και η εφαρμογή του σε μια σειρά από βασικά προβλήματα που χρησιμοποιούνται για τον έλεγχο της αξιοπιστίας και της γενικότερης συμπεριφοράς της μεθόδου. Οι υπολογισμοί και τα συμπεράσματα που προκύπτουν παρουσιάζονται αναλυτικά και μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε περαιτέρω πιο πολύπλοκες εφαρμογές.

Κλείνοντας τον πρόλογο, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα Καθηγητή μου κ. Δ. Βαλουγεώργη, του Καθηγητές μου κ. Ν. Βλάχο και κ. Β. Μποντόζογλου οι οποίοι ήταν μέλη της εξεταστικής επιτροπής, όλους τους Καθηγητές με τους οποίους συνεργάστηκα κατά τη διάρκεια της φοίτησής μου στο τμήμα, τους φοιτητές (προπτυχιακούς και μεταπτυχιακούς) του Εργαστηρίου Η/Υ, όλους τους συμφοιτητές μου, και ιδιαίτερα τους Ι. Χαρανά, Α. Ιατρίδη και Π. Κοτζιάπαση, την Α. Σούρμπη για την πολύτιμη ψυχολογική της στήριξη και φυσικά τους γονείς μου Μιχάλη και Γαρυφαλλιά για την απαραίτητη οικονομική και ψυχολογική στήριξη που μου παρείχαν όλα τα έτη των σπουδών μου.

ΕΠΕΞΗΓΗΣΗ ΣΥΜΒΟΛΩΝ

BGK	→	μοντέλο Bhatnagar – Gross – Krook
C_d	→	συντελεστής οπισθέλκουσας (drag coefficient)
c_s	→	ταχύτητα του ήχου
\mathbf{e}_i	→	διανύσματα κατεύθυνσης ταχυτήτων
F_d	→	δύναμη οπισθέλκουσας (drag force)
FCHC	→	Face – Centered – Hypercubic
FHP	→	τριγωνικό (ή εξαγωνικό) πλέγμα
f_i	→	συνάρτηση κατανομής σωματιδίων (particle distribution function)
f_i^{eq}	→	συνάρτηση κατανομής ισορροπίας (equilibrium distribution function)
$f_i^{(0)}$	→	συνάρτηση κατανομής ισορροπίας (equilibrium distribution function)
G	→	σταθερά ίση με την αρνητική κλίση της πίεσης
g	→	συνάρτηση κατανομής σωματιδίων στον συνεχή φυσικό χώρο
g^{eq}	→	συνάρτηση κατανομής ισορροπίας Maxell – Boltzmann
h_i	→	σταθερές στην εξίσωση BGK της ροής Poiseuille
L	→	πλάτος καναλιού ή κοιλότητας
L_N	→	αριθμός κομβικών διαστημ. κατά μήκος μιας πλευράς της κοιλότητας
LBE	→	Lattice Boltzmann Equation
LBM	→	Lattice Boltzmann Method
LG	→	Lattice Gas
LGA	→	Lattice Gas Automata
M	→	αριθμός Mach
M_{ij}	→	μητρώο σύγκρουσης (collision matrix)
N	→	συνολικός αριθμός κόμβων
p	→	πίεση (pressure)
Re	→	αριθμός Reynolds
t	→	χρόνος (time)
\mathbf{u}	→	μακροσκοπική ταχύτητα ρευστού (macroscopic flow velocity)
u_0	→	χαρακτηριστική ταχύτητα ρευστού
u, v	→	οριζόντια και κατακόρυφη συνιστώσα ταχύτητας αντίστοιχα

U, U_{out}	→	ταχύτητα άνω συνόρου (πλάκας) της κοιλότητας
w_i	→	συντελεστές βαρύτητας
\mathbf{x}	→	διάνυσμα θέσης κόμβου
α	→	ρυθμιζόμενη παράμετρος
δ	→	απόσταση δύο διαδοχικών κόμβων
Δ	→	μέση απόκλιση της πυκνότητας (mean variation of density)
μ	→	δυναμικό ιξώδες
ν	→	κινηματικό ιξώδες (kinematic viscosity)
ρ	→	πυκνότητα (density)
$\rho \mathbf{u}$	→	πυκνότητα ορμής (momentum density)
$\bar{\rho}$	→	μέση πυκνότητα (mean density)
ρ_0	→	αρχική ομοιόμορφη πυκνότητα
τ	→	χρόνος χαλάρωσης (single relaxation time)
ψ	→	ροϊκή συνάρτηση (stream function)
Ω_i	→	τελεστής σύγκρουσης (collision operator)
[...]	→	αναφορά
§	→	κεφάλαιο αναφοράς

Κεφάλαιο 1.

Εισαγωγή

Γενική εποπτεία των μεθόδων *Lattice Gas* και *Lattice Boltzmann*

Η μέθοδος *Lattice Gas Automata (LGA)* και η μετέπειτα εξέλιξή της, η μέθοδος *Lattice Boltzmann (LB)*, αποτελούν σχετικά νέες προσεγγίσεις στην υπολογιστική ρευστομηχανική και χρησιμοποιούν απλά μικροσκοπικά μοντέλα για να προσομοιώσουν τη μακροσκοπική συμπεριφορά της ροής των ρευστών. Οι μέθοδοι LGA και LB μπορούν θεωρηθούν ως δύο ξεχωριστές εκδόσεις της κινητικής θεωρίας. Η μετάβαση από το μικροσκοπικό μοντέλο της LGA στις μακροσκοπικές βασικές εξισώσεις της ρευστοδυναμικής, τις εξισώσεις Navier – Stokes, μπορεί να επιτευχθεί αυστηρά με μια στατιστική προσέγγιση μη – ισορροπίας ανάλογη της κινητικής θεωρίας των αερίων. Από τότε που προτάθηκε το πρώτο διδιάστατο μοντέλο, το οποίο αντιπροσώπευε τις εξισώσεις Navier – Stokes ασυμπίεστης ροής, από τους Frisch, Hasslacher & Pomeau (FHP) το 1986 [29], η μέθοδος LGA συγκέντρωσε περισσότερη προσοχή ως μια υποσχόμενη μέθοδος για την επίλυση ποικίλων μερικών διαφορικών εξισώσεων και τη μοντελοποίηση φυσικών φαινομένων [3 – §2, 21].

Υπάρχουν δύο βασικές προσεγγίσεις για τη μελέτη των φαινομένων μεταφοράς. Η πρώτη είναι η μακροσκοπική θεωρία του συνεχούς μέσου συμπεριλαμβανομένης της ρευστομηχανικής και θερμοδυναμικής. Η δεύτερη είναι η μεσοσκοπική προσέγγιση, ονομαζόμενη κινητική θεωρία, κλάδος της στατιστικής μηχανικής σε κατάσταση μη – ισορροπίας. Και οι δύο θεωρίες καταλήγουν στις ίδιες βασικές εξισώσεις για συστήματα τα οποία αποτελούνται από πολλά μόρια ή σωματίδια.

Η ρευστομηχανική μελετάει εφαρμογές ροής ρευστών από μακροσκοπικής άποψης. Ωστόσο, τα ρευστά αποτελούνται από διακριτά μόρια. Όταν εξετάζουμε ένα μακροσκοπικό σύστημα, δεν ενδιαφερόμαστε για τη λεπτομερή συμπεριφορά καθενός από τα μεμονωμένα μόρια. Η προσοχή μας συνήθως εστιάζεται στις μακροσκοπικές μεταβλητές που χαρακτηρίζουν την κατάσταση ενός σώματιδίου ρευστού (ένας μικρός όγκος που περιέχει πολλά μόρια, αλλά απλοποιημένα θεωρείται ως ένα σημείο στο χώρο) όπως η πυκνότητα, η πίεση και η ταχύτητα. Βασισμένη στην υπόθεση της συνέχειας και τις καταστατικές εξισώσεις, η ρευστομηχανική έχει τη δυνατότητα να χρησιμοποιεί μαθηματική ανάλυση για την εξαγωγή των εξισώσεων Navier – Stokes. Η έρευνα στη μηχανική ρευστών περιλαμβάνει την επίλυση των εξισώσεων Navier – Stokes με συγκεκριμένες συνοριακές συνθήκες και φυσικούς περιορισμούς.

Η θερμοδυναμική ανάλυση και η μετάδοση θερμότητας σε θερμικά συστήματα βασίζονται πάνω σε ορισμένους θεμελιώδεις νόμους, όπως ο πρώτος, ο δεύτερος και ο τρίτος νόμος της θερμοδυναμικής, ο νόμος του Fourier για την αγωγή και ο νόμος ψύξης του Νεύτωνα για τη συναγωγή. Αυτοί οι νόμοι προέρχονται από τις παρατηρήσεις και τα πειράματα. Χρησιμοποιώντας αυτούς τους νόμους σε συνδυασμό με ορισμένα απαραίτητα πειραματικά δεδομένα, μπορούμε να αποκομίσουμε πληροφορίες για συστήματα που βρίσκονται σε κατάσταση ισορροπίας ή πολύ κοντά στην ισορροπία.

Η στατιστική μηχανική και η κινητική θεωρία, απ' την άλλη μεριά, μελετούν μακροσκοπικά τα ρευστά και τα θερμικά συστήματα χρησιμοποιώντας μια μικροσκοπική προσέγγιση η οποία βασίζεται στην κίνηση ρεαλιστικών μοριακών μοντέλων. Για ένα σύστημα αποτελούμενο από πολλά μόρια, οι κινητικές εξισώσεις δεν μπορούν να επιλυθούν (ο αριθμός των μορίων για ένα αέριο σε κανονικές συνθήκες είναι περίπου $2.7 \times 10^{19} / \text{cm}^3$) και οι αρχικές συνθήκες είναι άγνωστες. Η στατιστική μηχανική ξεπερνάει αυτό το πρόβλημα θεωρώντας όλες τις δυνατές καταστάσεις σε ένα σύστημα και βρίσκοντας την πιθανότητα κάθε κατάστασης. Μια μακροσκοπική ποσότητα λαμβάνεται αποτιμώντας έναν σταθμικό μέσο όρο μιας φυσικής ποσότητας σε όλες αυτές τις καταστάσεις. Με αυτόν τον τρόπο, λαμβάνονται τα τρία ακόλουθα επίπεδα εξισώσεων: η εξίσωση Liouville [3 – §2 – 2.3.3] στο μικροσκοπικό επίπεδο, οι κινητικές εξισώσεις (συμπεριλαμβανομένης και της εξίσωσης Boltzmann) στο μεσοσκοπικό επίπεδο, και οι εξισώσεις Navier – Stokes στο μακροσκοπικό επίπεδο. Επίσης, και οι τρεις νόμοι της θερμοδυναμικής μπορούν

να ικανοποιηθούν. Μολονότι και οι δύο μέθοδοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εξαγωγή των μακροσκοπικών εξισώσεων, υλικές ιδιότητες (όπως το ιξώδες) που εμφανίζονται στις εξισώσεις Navier – Stokes εξαρτώνται από τη δυναμική των μορίων και μπορούν να ληφθούν μόνο με τη στατιστική μηχανική ή με πειραματικές μεθόδους. Σε πολλές περιπτώσεις, ωστόσο, είναι δύσκολη η χρήση μεθόδων στατιστικής μηχανικής.

Η συστηματική έρευνα μακροσκοπικών συστημάτων (αέριων, υγρών ή στερεών) ξεκίνησε τον περασμένο αιώνα. Οι νόμοι (βασικές εξισώσεις) που ανακαλύφθηκαν αποτέλεσαν τη βάση των υποθέσεων της θερμοδυναμικής και της ρευστομηχανικής. Από τότε, η ποσοτική έρευνα που εστίασε στην επίλυση αυτών των βασικών εξισώσεων έχει γίνει εκτεταμένη. Ωστόσο, επειδή οι εξισώσεις Navier – Stokes είναι μη – γραμμικές μερικές διαφορικές εξισώσεις και αλλάζουν μορφή σε διαφορετικά συστήματα που εξαρτώνται από τον αριθμό Mach, τα προβλήματα που μπορούν να επιλυθούν αναλυτικά περιορίζονται σε εκείνα με φυσικούς περιορισμούς και απλές γεωμετρίες. Πριν από είκοσι χρόνια περίπου, τα περισσότερα πρακτικά προβλήματα, όπως η ροή σε μια πτέρυγα, βασίζονταν σε πειραματική εργασία, η οποία συχνά ήταν πολυδάπανη. Ακόμα και οι πειραματικές λύσεις είναι μέχρι σήμερα αδύνατες για ορισμένα σημαντικά προβλήματα.

Με την εμφάνιση των ψηφιακών υπολογιστών και τη ραγδαία εξέλιξή τους, κατέστη δυνατή η λήψη αριθμητικών λύσεων των εξισώσεων Navier – Stokes. Τις τελευταίες δύο δεκαετίες ο τομέας της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (CFD) έχει αναπτύξει μια ποικιλία αριθμητικών μεθόδων με ακρίβεια που συνεχώς αυξάνει. Σχεδόν όλες οι κλασικές αριθμητικές μέθοδοι της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής βασίζονται είτε στις διαφορικές, είτε στις ολοκληρωτικές μορφές των εξισώσεων διατήρησης της συνέχειας και δίνουν προσεγγιστικές λύσεις λόγω της διακριτοποιημένης γεωμετρίας.

Παρόλη την τεράστια πρόοδο της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής, υφίστανται ακόμη περιορισμοί εξαιτίας των δυνατοτήτων των ηλεκτρονικών υπολογιστών. Παρόλη την ύπαρξη των σημερινών υπερυπολογιστών, όπως ο CRAY Y – MP που διαθέτει 4 επεξεργαστές, 2 gigawords μνήμη και 2 gigaflops κανονικής επίδοσης, η πλήρης εκμετάλλευση των αριθμητικών προσομοιώσεων ως μια ανεξάρτητη προσέγγιση της λύσης των επιστημονικών και τεχνολογικών προβλημάτων, όπως η τυρβώδης ροή για αριθμό Re πάνω από 10^8 ή η πλήρως ανεπτυγμένη ροή σε ολόκληρο το αεροσκάφος, απαιτεί ταχύτητα υπολογιστή της

τάξεως των exa (10^{18}) flops και μνήμη της τάξεως των exa (10^{18}) words χρησιμοποιώντας συγχρόνως τους υπάρχοντες αλγόριθμους επίλυσης και χρόνο της τάξεως των 15 λεπτών. Είναι φανερό ότι πρέπει να προχωρήσουμε αρκετές τάξεις μεγέθους ανάπτυξης τόσο σε ταχύτητα όσο και σε μνήμη, προκειμένου να επιλυθούν τα σύγχρονα προβλήματα που μας ενδιαφέρουν. Οι ανάγκες αυτές προκύπτουν θεωρώντας τους σημερινούς αλγόριθμους επίλυσης και την αρχιτεκτονική των υπολογιστών. Επειδή οι τεχνολογίες των βαθμωτών και διανυσματικών υπολογιστών έχουν ήδη αναπτυχθεί σημαντικά, περαιτέρω τελειοποίηση στον συγκεκριμένο τομέα είναι δύσκολο να αποφέρει σημαντική αύξηση της υπολογιστικής επίδοσης. Οι μαζικοί παράλληλοι επεξεργαστές φαίνεται να κατέχουν κυρίαρχη θέση και να γεφυρώνουν σταδιακά το κενό ανάμεσα στις υπολογιστικές ανάγκες και την υπάρχουσα επίδοση των υπερυπολογιστών.

Οι συμβατικοί υπολογιστές, οι οποίοι διαθέτουν έναν μονό επεξεργαστή, εκτελούν μια μαθηματική ή λογική πράξη σε κάθε κύκλο. Ο χρόνος σε κάθε κύκλο (cycle time) περιορίζεται θεωρητικά από την πεπερασμένη ταχύτητα διάδοσης του φωτός. Το μήκος των καναλιών μεταφοράς σημάτων (signal paths) σε έναν σειριακό υπολογιστή περιορίζει τον ελάχιστο χρόνο σε κάθε κύκλο, οπότε υπάρχει μια σύγκρουση ανάμεσα στην ταχύτητα και το μέγεθος του υπολογιστή [19]. Οι μαζικοί παράλληλοι υπολογιστές, από την άλλη πλευρά, χρησιμοποιούν πολλαπλές οδηγίες και επεξεργάζονται πολλαπλά δεδομένα ταυτόχρονα σε όλους τους επεξεργαστές. Γι' αυτόν τον λόγο, το μέγεθος και η ταχύτητα σε έναν παράλληλο υπολογιστή μπορούν να δεκαπλασιαστούν. Η αποδοτική χρήση των μαζικά παράλληλων υπολογιστών απαιτεί νέους παράλληλους αλγορίθμους. Οι μέθοδοι Lattice Gas Automata και Lattice Boltzmann είναι πλήρως παραλληλίσσιμοι αλγόριθμοι.

Η μέθοδος Lattice Gas αποτελεί βασικά μια καινούρια στρατηγική προσομοίωσης για τη ρευστομηχανική και άλλα φυσικά συστήματα. Η LGA σχεδιάστηκε ως ένας απλοποιημένος, φανταστικός μικρόκοσμος στον οποίο ο χώρος, ο χρόνος και οι ταχύτητες των σωματιδίων είναι όλα διακριτά. Γενικά, η LGA αποτελείται από ένα κανονικό πλέγμα με τα σωματίδια να ανήκουν στους κόμβους. Καθορίζεται μια ομάδα μεταβλητών Boole $n_i(\mathbf{x},t)$ ($i = 1, \dots, b$), η οποία περιγράφει την κατοχή του σωματιδίου και το b είναι ο αριθμός των κατευθύνσεων της ταχύτητας του σωματιδίου σε κάθε κόμβο. Ξεκινώντας από μια αρχική κατάσταση, η διαμόρφωση των σωματιδίων εξελίσσεται σε δύο διαδοχικά βήματα: (α) ροή (streaming), στην οποία κάθε σωματίδιο μετακινείται στον πλησιέστερο κόμβο στην

κατεύθυνση της ταχύτητάς του, και (β) σύγκρουση (colliding), η οποία λαμβάνει χώρα όταν τα σωματίδια που φτάνουν σε έναν κόμβο αλληλεπιδρούν και πιθανώς αλλάζουν οι κατευθύνσεις των ταχυτήτων τους σύμφωνα με τους κανόνες διάχυσης. Για απλότητα, η περιοριστική αρχή (δεν επιτρέπεται περισσότερα από ένα σωματίδιο σε δεδομένο χρόνο και κόμβο να μετακινείται σε δεδομένη κατεύθυνση) επιβάλλεται για την αποδοτικότητα της μνήμης του υπολογιστή και οδηγεί στην κατανομή ισορροπίας των Fermi – Dirac. Η στρατηγική της μεθόδου Lattice Gas αποτελείται από δύο κλάδους: (α) την κατασκευή ενός μοντέλου του μικρόκοσμου όσο το δυνατόν απλούστερο ώστε να επιτρέπει την προσομοίωση ενός συστήματος αποτελούμενο από πολλά σωματίδια και (β) να περιλαμβάνει τα βασικά χαρακτηριστικά των πραγματικών φαινομένων σύγκρουσης ανάμεσα στα σωματίδια ώστε, για μεγάλους χρόνους και μεγάλες κλίμακες, να υπολογίζονται με ακρίβεια τα μακροσκοπικά φαινόμενα μεταφοράς.

Το γεγονός ότι η εξέλιξη της κατάστασης των σωματιδίων σε ένα τεχνητό πλέγμα μπορεί να προσομοιώσει τη μακροσκοπική συμπεριφορά της ροής του ρευστού, βασίζεται στα ακόλουθα γεγονότα: η μακροδυναμική ενός ρευστού είναι το αποτέλεσμα της συλλογικής συμπεριφοράς πολλών σωματιδίων του συστήματος και οι λεπτομέρειες της μικροσκοπικής αλληλεπίδρασής τους δεν αποτελούν ουσιαστικό ενδιαφέρον. Μεταβολές στη μοριακή αλληλεπίδραση μπορούν να προκαλέσουν αλλαγές στις ιδιότητες μεταφοράς, όπως το ιξώδες, αλλά δεν μεταβάλλουν τη βασική μορφή των μακροσκοπικών εξισώσεων όσο οι βασικοί νόμοι διατήρησης και οι απαραίτητες συμμετρίες ικανοποιούνται.

Το πρώτο διάστατο, πλήρως ντετερμινιστικό μοντέλο Lattice Gas (γνωστό ως μοντέλο HPP) με τετραγωνικό πλέγμα παρουσιάστηκε από τους Hardy, de Pazzis & Pomeau το 1973 [30]. Το μοντέλο HPP παρήγαγε φαινόμενα ηχητικών κυμάτων χρησιμοποιώντας την MIT cellular automata machine, αλλά απέτυχε να προσομοιώσει την εξίσωση Navier – Stokes διότι δεν ικανοποιούσε τις απαραίτητες ισοτροπικές απαιτήσεις και περιείχε ιδιαίτερα μεγάλο πλήθος νόμων διατήρησης. Για δεκατρία χρόνια δεν σημειώθηκε πρόοδος που να ξεπερνάει αυτή τη δυσκολία, μέχρι το 1986 όταν οι Frisch, Hasslacher & Pomeau [29] δημιούργησαν ένα τριγωνικό πλέγμα (το οποίο μπορεί να ειπωθεί και ως εξαγωνικό πλέγμα) και ισχυρίστηκαν ότι αυτό το μοντέλο οδηγεί στις διδιάστατες εξισώσεις Navier – Stokes. Μοντέλα που σχεδιάστηκαν για τριδιάστατα προβλήματα παρουσιάστηκαν από τους d’Humières,

Lallemand & Frisch το 1986 [31]. Οι συνεισφορές αυτές εξασφάλισαν ένα θεμέλιο για τη ραγδαία ανάπτυξη των μεθόδων Lattice Gas.

Τα βασικά χαρακτηριστικά των μεθόδων Lattice Gas είναι πολύ διαφορετικά από αυτά των κλασικών αριθμητικών μεθόδων. Λόγω της διακριτοποιημένης φύσης τους, η χρήση των μεταβλητών Boole και ο κανόνας της τοπικής εξέλιξης, η κατάσταση σε κάθε θέση του πλέγματος της Lattice Gas περιγράφεται από ένα μικρό πλήθος διακριτοποιημένων bits με τιμές 0 ή 1 αντί για συνεχείς τιμές. Οι απαιτούμενες μαθηματικές πράξεις είναι ακέραιες αντί κινητής υποδιαστολής. Η τιμή μιας μακροσκοπικής ποσότητας σε μια περιοχή εξαρτάται μόνο από τις τιμές των γειτονικών σημείων. Η πληροφορία δεν διαδίδεται σε ολόκληρο το πλέγμα σε ένα μόνο χρονικό βήμα. Η εξέλιξη των τιμών της Lattice Gas λαμβάνει χώρα με εναλλαγή των διαδικασιών ροής (streaming) και σύγκρουσης (collision). Όσον αφορά την αρχιτεκτονική ενός υπολογιστή, τα παραπάνω χαρακτηριστικά που περιγράφονται είναι ιδανικά για έναν παράλληλο υπολογιστή.

Πολλά πλεονεκτήματα της μεθόδου Lattice Gas απορρέουν από τις διαδικασίες που περιγράφονται παραπάνω. Πρώτον, η μέθοδος χρησιμοποιεί τη μνήμη του υπολογιστή πολύ αποτελεσματικά. Για το μοντέλο FHP απαιτούνται μόνο 6 bits πληροφορίας για να καθορίσουν πλήρως την κατάσταση σε κάθε περιοχή. Ενώ μια λέξη (word) αποθηκεύει έναν απλό αριθμό κινητής υποδιαστολής σε άλλες μεθόδους, μια 64-bit λέξη μπορεί να αποθηκεύσει πληροφορίες για 10 2/3 περιοχές στη μέθοδο Lattice Gas. {Μια λέξη (word) είναι η συλλογή από bits που χρησιμοποιείται για να αναπαραστήσει μια αριθμητική πληροφορία. Τυπικά, το μήκος μιας λέξης μπορεί να κυμαίνεται από 4 bits σε μικρές ψηφιακές συσκευές μέχρι 32 bits και άνω σε ηλεκτρονικούς υπολογιστές. Μια λέξη αποτελούμενη από 8 bits ορίζεται ως 1 byte.} Δεύτερον, η μέθοδος Lattice Gas δεν έχει σφάλμα στρογγυλοποίησης (roundoff error), ούτε προβλήματα σταθερότητας (stability) επειδή οι τελεστές είναι ακέραιοι (0 και 1). Τρίτον, οι συννοριακές συνθήκες είναι σχετικά εύκολο να υλοποιηθούν και δεν απαιτούν πολύ πρόσθετο χρόνο υπολογισμού. Οι τιμές στους συννοριακούς κόμβους ανανεώνονται με έναν κάπως διαφορετικό τρόπο καθιστώντας τη μέθοδο Lattice Gas ειδικά κατάλληλη για προβλήματα με πολύπλοκα όρια. Τέλος, ο υπολογισμός είναι αποδοτικός εξαιτίας της πλήρως παράλληλης φύσης της μεθόδου.

Η μέθοδος Lattice Gas έχει επίσης τρία ανεπιθύμητα χαρακτηριστικά.

(α) non – Galilean σταθερότητα λόγω της ύπαρξης των εξαρτώμενων συντελεστών

από την πυκνότητα στους όρους συναγωγής των εξισώσεων Navier – Stokes. (b) μια αφύσικη εξάρτηση της πίεσης από την ταχύτητα. (γ) ενυπάρχων στατιστικός θόρυβος ο οποίος απαιτεί χωρικό ή χρονικό μέσο όρο για να ληφθούν ομαλές μακροσκοπικές ποσότητες.

Για να ξεπεραστούν μερικά από τα ενυπάρχοντα προβλήματα, αρκετά μοντέλα Lattice Boltzmann έχουν προταθεί. Ένα βασικό χαρακτηριστικό της μεθόδου LB είναι η αντικατάσταση των μεταβλητών των σωματιδίων n_i (μεταβλητές Boole) στην εξίσωση εξέλιξης (evolution equation) με τις συναρτήσεις κατανομής των σωματιδίων (πραγματικές μεταβλητές) $f_i = \langle n_i \rangle$, όπου $\langle . \rangle$ δηλώνουν έναν τοπικό συνολικό μέσο.

Η εξίσωση Lattice Boltzmann ως ένα αριθμητικό σχήμα προτάθηκε πρώτα από τους Mc Namara & Zanetti [32]. Στο μοντέλο τους, η μορφή του τελεστή σύγκρουσης (collision operator) είναι ακριβώς η ίδια όπως στο μοντέλο LGA, παρόλο που είναι γραμμένη σε όρους των εξισώσεων κατανομής και αγνοεί τα αποτελέσματα των συσχετίσεων μεταξύ των σωματιδίων. Οι Higuera, Jimenez and Succi [33, 34] εισάγουν έναν γραμμικοποιημένο, μητρικό τελεστή σύγκρουσης που αποφεύγει τους λεπτομερείς νόμους σύγκρουσης (collision rules). Ο στατιστικός θόρυβος εξαλείφεται και στα δύο μοντέλα. Ωστόσο, άλλα προβλήματα παραμένουν αφού η κατανομή ισορροπίας είναι ακόμη Fermi – Dirac. Το μοντέλο Lattice Boltzmann που προτάθηκε από τους Chen *et al.* [35, 36] and Qian *et al.* [37, 38] εγκαταλείπει τις στατιστικές Fermi – Dirac και παρέχει την απαιτούμενη ελευθερία της κατανομής ισορροπίας για να ικανοποιεί την ισοτροπία, την σταθερότητα Galilean και να έχει μια ανεξάρτητη της ταχύτητας πίεση. Το μοντέλο αυτό εφαρμόζει την προσέγγιση απλού χρόνου χαλάρωσης (single relaxation time approximation) που προτάθηκε πρώτα από τους **Batnager, Gross & Krook** το 1954 [22], ώστε να απλοποιηθεί πολύ ο τελεστής σύγκρουσης. Το συγκεκριμένο μοντέλο καλείται ‘The Lattice Boltzmann BGK Model’.

Συγκρινόμενη με την μέθοδο Lattice Gas, η μέθοδος Lattice Boltzmann είναι περισσότερο αποδοτική υπολογιστικά χρησιμοποιώντας τους σύγχρονους παράλληλους υπολογιστές. Επειδή η μέθοδος LB ασχολείται με τις συναρτήσεις κατανομής των σωματιδίων, οι οποίες είναι πραγματικοί αριθμοί με τιμές από 0 μέχρι 1, οι μεταβλητές Boole και η απόλυτη σταθερότητα της LGA παύουν να υπάρχουν. Έχουν εκτελεστεί υπολογισμοί κάνοντας χρήση και των δύο μεθόδων σε προβλήματα

υδροδυναμικής, ροής σε πορώδες μέσον, μαγνητοϋδροδυναμικής, πολυφασικών ροών και στην εξίσωση αντίδρασης – διάχυσης. Η μέθοδος LBM περιγράφεται λεπτομερώς στο επόμενο κεφάλαιο.

Ο στόχος της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας είναι η επίλυση πρότυπων προβλημάτων ροής με τη μέθοδο LBM και η μελέτη της συμπεριφοράς και της αξιοπιστίας της. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν συγκρίνονται λεπτομερώς με ήδη υπάρχοντα αξιόπιστα αποτελέσματα. Τα συμπεράσματα και οι παρατηρήσεις που αναφέρονται μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την επίλυση πιο σύνθετων προβλημάτων της ρευστομηχανικής με τη συγκεκριμένη μέθοδο.

Η δομή της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας έχει ως εξής: Έπειτα από την εισαγωγική αναφορά που έγινε στο παρόν Κεφάλαιο, ακολουθεί στο Κεφάλαιο 2 η παρουσίαση της θεωρίας της LBM. Εξάγονται συνοπτικά οι εξισώσεις μάζας και ορμής (Navier – Stokes) από την εξίσωση LB, αποδεικνύεται συνοπτικά πως η LBE αποτελεί προσέγγιση της εξίσωσης συνέχειας του Boltzmann και τέλος αναφέρονται τα πλεγματικά μοντέλα που συνήθως χρησιμοποιούνται στις προσομοιώσεις. Στο Κεφάλαιο 3 εξάγονται οι αναλυτικές λύσεις των ροών Poiseuille και Couette χρησιμοποιώντας την LBM σε δύο διαφορετικά πλέγματα (εξαγωνικό και τετραγωνικό). Από την εφαρμογή αυτή προκύπτουν σημαντικά συμπεράσματα, ιδιαίτερα για τις συνοριακές συνθήκες. Η μεθοδολογία παρουσιάζεται αναλυτικά και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εξαγωγή και άλλων αναλυτικών λύσεων σε προβλήματα, όπου αυτές υφίστανται. Στο Κεφάλαιο 4 επιλύονται αριθμητικά οι δύο προαναφερθείσες ροές και στα δύο πλέγματα. Ελέγχεται η υλοποίηση των συνοριακών συνθηκών (η οποία περιγράφεται αναλυτικά) και προκύπτουν συμπεράσματα για το εύρος τιμών των διαφόρων παραμέτρων και πως επηρεάζουν την ταχύτητα σύγκλισης του αλγόριθμου. Επίσης, γίνεται και σύγκριση των δύο πλεγμάτων. Στο Κεφάλαιο 5 προσομοιώνεται το κλασσικό πρόβλημα της διδιάστατης ροής σε ορθογωνική κοιλότητα. Γίνεται λεπτομερής σύγκριση με υπάρχοντα αξιόπιστα αποτελέσματα στο πεδίο ταχυτήτων, πίεσης, γεωμετρίας κύριων και δευτερευουσών δινών και στην οπισθέλκουσα του άνω κινούμενου συνόρου, για διαφορετικούς αριθμούς Re . Προκύπτουν συμπεράσματα για την ευστάθεια και σύγκλιση της μεθόδου, το εύρος των παραμέτρων και το σφάλμα συμπίεστότητας. Στο Κεφάλαιο 6 επεκτείνουμε τις εφαρμογές μας στις τρεις διαστάσεις επιλύοντας το πρόβλημα της ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής, χρησιμοποιώντας το κυβικό πλέγμα 15 κατευθύνσεων. Τέλος, στο Κεφάλαιο 7 συνοψίζονται τα βασικότερα

συμπεράσματα και γίνονται προτάσεις για περαιτέρω εφαρμογές χρησιμοποιώντας τη συγκεκριμένη μέθοδο. Επίσης, στο παράρτημα παρατίθενται οι βασικότεροι κώδικες που χρησιμοποιήθηκαν κατά τη διάρκεια εκπόνησης της Διπλωματικής Εργασίας.

Κεφάλαιο 2.

Συνοπτική θεωρία της μεθόδου Lattice Boltzmann

2.1 Εισαγωγή

Υπάρχουν πολλά απλά, διακριτά μοντέλα της φυσικής τα οποία είναι ικανά να προσεγγίσουν σωστά τις πολυπλοκότητες των πραγματικών φαινομένων. Γνωστό παράδειγμα αποτελεί το μοντέλο Ising, το οποίο είναι ένα πολύ απλό υποκατάστατο των πολύπλοκων ατομικών αλληλεπιδράσεων σε έναν φερομαγνήτη, αλλά καταφέρνει να προσεγγίσει την ύπαρξη των κριτικών φάσεων μετάβασης. Το γεγονός αυτό ήταν ένα από τα αρχικά κίνητρα των Hardy, Pomeau & Pazzis όταν εισήγαγαν το πρώτο πλεγματικό μοντέλο το 1973 [30]. Είναι επιθυμητή η κατασκευή ενός μοντέλου το οποίο να μπορεί να προσομοιώνει σωστά τη μακροσκοπική συμπεριφορά των ρευστών ενώ ταυτόχρονα να είναι όσο το δυνατόν απλούστερο μικροσκοπικά.

Σε μικροσκοπικό επίπεδο, τα ρευστά αποτελούνται από άτομα τα οποία μπορούν να θεωρηθούν ως συνεχή μέσα σε κλίμακες πολύ μεγαλύτερες των τυπικών ενδοατομικών αποστάσεων. Η ρευστομηχανική των συνεχών μέσων περιγράφεται από τις εξισώσεις της υδροδυναμικής, οι οποίες αγνοούν εντελώς τις λεπτομέρειες των μοριακών δυνάμεων. Ως αποτέλεσμα, η ολική συμπεριφορά των ρευστών μπορεί να βρεθεί χωρίς την ενσωμάτωση των λεπτομερειών των μικροσκοπικών μοριακών αλληλεπιδράσεων. Η έλλειψη εξάρτησης της υδροδυναμικής από τις μικροσκοπικές ιδιότητες των ρευστών αποτελεί τη βάση των μεθόδων lattice gas. Τα συστατικά – κλειδιά που οδηγούν από τους μικροσκοπικούς νόμους κίνησης στη δυναμική των

ρευστών είναι οι νόμοι της διατήρησης και οι συμμετρίες. Πράγματι, δύο ρευστά με εντελώς διαφορετικές μικροσκοπικές δομές μπορούν να εμφανίζουν την ίδια μακροσκοπική συμπεριφορά επειδή ο τύπος των μακροσκοπικών εξισώσεων ελέγχεται από τους μικροσκοπικούς νόμους διατήρησης και τις απαραίτητες συμμετρίες.

Στο κεφάλαιο αυτό εξάγουμε συνοπτικά τις μακροσκοπικές εξισώσεις μάζας και ορμής (Navier – Stokes) ξεκινώντας από την εξίσωση Lattice Boltzmann (LBE), δείχνουμε συνοπτικά πως η LBE αποτελεί προσέγγιση της εξίσωσης συνέχειας του Boltzmann, και αναφέρουμε τα πλεγματικά μοντέλα που συνήθως χρησιμοποιούνται στις προσομοιώσεις. Επίσης, γίνεται αναφορά στη συνοριακή συνθήκη σε τοίχωμα της μεθόδου Lattice Boltzmann (LBM). [1, 3 – §3]

2.2 Συνοπτική μαθηματική θεώρηση της LBM

Όπως προαναφέρθηκε, η LBM αποτελεί εξέλιξη της LGA, μια διακριτοποιημένη μέθοδος κινητικής των μορίων που κάνει χρήση διακριτοποιημένου πλέγματος και χρόνου. Γενικά, η LGA αποτελείται από ένα ομοιόμορφο πλέγμα με τα σωματίδια να ανήκουν στους κόμβους. Ορίζεται μια ομάδα από μεταβλητές Boole $n_i(\mathbf{x}, t)$ ($i = 1, \dots, M$) που περιγράφει την κατοχή των σωματιδίων, όπου M είναι το πλήθος των κατευθύνσεων των ταχυτήτων των σωματιδίων σε κάθε κόμβο. Η εξίσωση εξέλιξης (evolution equation) της LGA είναι η ακόλουθη:

$$n_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = n_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(n(\mathbf{x}, t)), \quad (i = 0, 1, \dots, M) \quad (2.1)$$

όπου \mathbf{e}_i είναι τα τοπικά διανύσματα ταχυτήτων. Ξεκινώντας από μια αρχική κατάσταση, η διαμόρφωση των σωματιδίων εξελίσσεται σε δύο διαδοχικά στάδια: (α) ροή (streaming), στην οποία κάθε σωματίδιο μετακινείται στον πλησιέστερο κόμβο στην κατεύθυνση της ταχύτητάς του, και (β) σύγκρουση (colliding), η οποία λαμβάνει χώρα όταν τα σωματίδια που φτάνουν σε έναν κόμβο αλληλεπιδρούν και πιθανώς αλλάζουν οι κατευθύνσεις των ταχυτήτων τους σύμφωνα με τους κανόνες διάχυσης. Ένα βασικό χαρακτηριστικό της μεθόδου LB είναι η αντικατάσταση των μεταβλητών των σωματιδίων n_i (μεταβλητές Boole) στην εξίσωση εξέλιξης (2.1) με τις συναρτήσεις κατανομής των σωματιδίων (πραγματικές μεταβλητές) $f_i = \langle n_i \rangle$ {όπου $\langle \cdot \rangle$ δηλώνουν έναν τοπικό συνολικό μέσο}, αγνοώντας την ξεχωριστή κίνηση του κάθε σωματιδίου, όπως και τη σχετική αλληλεπίδρασή τους.

Υπάρχουν αρκετοί τρόποι για να εξαχθεί η εξίσωση Lattice Boltzmann (LBE) είτε από μοντέλα διακριτοποιημένων ταχυτήτων, είτε από την κινητική εξίσωση Boltzmann. Υπάρχουν επίσης και αρκετοί τρόποι για να εξαχθούν οι μακροσκοπικές εξισώσεις Navier – Stokes από την LBE. Επειδή η LBM προέρχεται από την LGA, θα παρουσιάσουμε την LBE από μια διακριτοποιημένη κινητική εξίσωση της συνάρτησης κατανομής των σωματιδίων, η οποία είναι όμοια με την κινητική εξίσωση (2.1) της LGA:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \Delta x, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) + \Omega_i(f(\mathbf{x}, t)), \quad (i = 0, 1, \dots, M) \quad (2.2)$$

όπου f_i είναι η συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων κατά μήκος της κατεύθυνσης i και Ω_i είναι ο τελεστής σύγκρουσης (collision operator) ο οποίος αντιπροσωπεύει το βαθμό αλλαγής των f_i που προέρχεται από σύγκρουση. Τα Δx , Δt αντιστοιχούν στην αύξηση του χρόνου και του διαστήματος. Όταν $\Delta x / \Delta t = |\mathbf{e}_i|$, οι εξισώσεις (2.1) και (2.2) έχουν την ίδια διακριτοποίηση. Το Ω_i εξαρτάται μόνο από την τοπική συνάρτηση κατανομής. Στη μέθοδο LBM, ο χώρος είναι διακριτοποιημένος με τέτοιο τρόπο ώστε να είναι σύμφωνος με την κινηματική εξίσωση, δηλαδή οι συντεταγμένες των πλησιέστερων γειτονικών κόμβων γύρω από το \mathbf{x} είναι $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i$.

Η πυκνότητα ρ και η πυκνότητα ορμής $\rho \mathbf{u}$ ορίζονται από τις συναρτήσεις κατανομής των σωματιδίων σύμφωνα με τις σχέσεις:

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{e}_i \quad (2.3)$$

όπου $\sum_i \equiv \sum_{i=1}^M$. Το Ω_i απαιτείται να ικανοποιεί τη διατήρηση της συνολικής μάζας και της συνολικής ορμής σε κάθε κόμβο:

$$\sum_i \Omega_i = 0, \quad \sum_i \Omega_i \mathbf{e}_i = 0 \quad (2.4)$$

Θεωρώντας το πλεγματικό διάστημα Δx και την αύξηση του χρόνου Δt ως μικρές παραμέτρους της ίδιας τάξεως ε , και εφαρμόζοντας ανάπτυγμα Taylor ως προς το χώρο και χρόνο στην Εξ. (2.2), παίρνουμε την ακόλουθη μορφή συνέχειας της κινηματικής εξίσωσης ακρίβειας $2^{\text{ης}}$ τάξεως ως προς ε :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla f_i + \varepsilon \left(\frac{1}{2} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i : \nabla \nabla f_i + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_i}{\partial t^2} \right) = \frac{\Omega_i}{\varepsilon} \quad (2.5)$$

Για να προκύψει η μακροσκοπική υδροδυναμική εξίσωση, εφαρμόζουμε ανάπτυγμα Chapman – Enskog:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2}, \quad \frac{\partial}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial x_1} \right]$$

Ο παραπάνω τύπος υποθέτει πως ο χρόνος διάχυσης t_2 είναι πολύ μικρότερος του χρόνου συναγωγής t_1 . Παρόμοια, η συνάρτηση κατανομής ενός σωματιδίου f_i μπορεί να αναπτυχθεί κανονικά ως προς την τοπική συνάρτηση κατανομής ισορροπίας f_i^{eq} ,

$$f_i = f_i^{eq} + \varepsilon f_i^{(neq)} \quad (2.6)$$

Στην παραπάνω σχέση, το f_i^{eq} εξαρτάται από τις τοπικές μακροσκοπικές μεταβλητές (ρ και $\rho \mathbf{u}$) και πρέπει να ικανοποιεί τους ακόλουθους περιορισμούς:

$$\sum_i f_i^{eq} = \rho, \quad \sum_i f_i^{eq} \mathbf{e}_i = \rho \mathbf{u} \quad (2.7)$$

Η εξίσωση $f_i^{(neq)} = f_i^{(1)} + \varepsilon f_i^{(2)} + O(\varepsilon^2)$ είναι η συνάρτηση κατανομής μη – ισορροπίας, η οποία ικανοποιεί τους ακόλουθους περιορισμούς:

$$\sum_i f_i^{(k)} = 0, \quad \sum_i f_i^{(k)} \mathbf{e}_i = 0 \quad (2.8)$$

για $k = 1$ και $k = 2$.

Αντικαθιστώντας το f_i στον τελεστή σύγκρουσης Ω_i , το ανάπτυγμα Taylor μας δίνει:

$$\begin{aligned} \Omega_i(f) &= \Omega_i(f^{eq}) + \varepsilon \frac{\partial \Omega_i(f^{eq})}{\partial f_j} f_j^{(1)} \\ &+ \varepsilon^2 \left[\frac{\partial \Omega_i(f^{eq})}{\partial f_j} f_j^{(2)} + \frac{\partial^2 \Omega_i(f^{eq})}{\partial f_j \partial f_k} f_j^{(1)} f_k^{(1)} \right] + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Από την Εξ.(2.5) σημειώνουμε πως όταν $\varepsilon \rightarrow 0$, έχουμε $\Omega_i(f^{eq}) = 0$. Το γεγονός αυτό οδηγεί σε έναν γραμμικοποιημένο τελεστή σύγκρουσης :

$$\frac{\Omega_i(f)}{\varepsilon} = \frac{M_{ij}}{\varepsilon} (f_j - f_j^{eq}) \quad (2.10)$$

όπου $M_{ij} \equiv \frac{\partial \Omega_i(f^{eq})}{\partial f_j}$ το μητρώο σύγκρουσης [23], το οποίο προσδιορίζει το βαθμό

διασκόρπισης μεταξύ των κατευθύνσεων i και j . Για ένα δεδομένο πλέγμα, το M_{ij} εξαρτάται από τη γωνία που σχηματίζουν οι κατευθύνσεις i και j , και έχει έναν περιορισμένο αριθμό μεταβλητών. Για τη διατήρηση της μάζας και της ορμής, το M_{ij} ικανοποιεί τους ακόλουθους περιορισμούς:

$$\sum_{i=1}^M M_{ij} = 0, \quad \sum_{i=1}^M \mathbf{e}_i M_{ij} = 0 \quad (2.11)$$

Αν θεωρήσουμε περαιτέρω ότι η τοπική κατανομή σωματιδίων ηρεμεί προς μια κατάσταση ισορροπίας με ρυθμό τ ,

$$M_{ij} = -\frac{1}{\tau} \delta_{ij} \quad (2.12)$$

(τ είναι ο χρόνος χαλάρωσης ο οποίος ελέγχει το ρυθμό προσέγγισης της ισορροπίας) καταλήγουμε στον όρο σύγκρουσης BGK:

$$\frac{\Omega_i}{\varepsilon} = -\frac{1}{\tau} f_i^{\text{neq}} = -\frac{1}{\varepsilon \tau} (f_i^{(1)} + \varepsilon f_i^{(2)}) \quad (2.13)$$

και στην εξίσωση LBGK:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{f_i - f_i^{\text{eq}}}{\tau} \quad (2.14)$$

Από την Εξ.(2.5) προκύπτουν οι παρακάτω εξισώσεις:

$$\frac{\partial f_i^{\text{eq}}}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla_1 f_i^{\text{eq}} = -\frac{f_i^{(1)}}{\tau} \quad (2.15)$$

τάξεως ε^0 , και

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{(1)} + \frac{\partial}{\partial t_2} f_i^{\text{eq}} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla f_i^{(1)} + \frac{1}{2} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i : \nabla \nabla f_i^{\text{eq}} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla \frac{\partial}{\partial t_1} f_i^{\text{eq}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial t_1^2} f_i^{\text{eq}} = \\ = \frac{f_i^{(2)}}{\tau} \end{aligned} \quad (2.16)$$

τάξεως ε^1 . Χρησιμοποιώντας την Εξ.(2.15) και κάνοντας αλγεβρικούς μετασχηματισμούς, ξαναγράφουμε την 1^ης τάξεως εξίσωση ως:

$$\frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t_2} + \left(1 - \frac{2}{\tau}\right) \left[\frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t_1} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla f_i^{(1)} \right] = -\frac{f_i^{(2)}}{\tau} \quad (2.17)$$

Από τις Εξ.(2.15), (2.17) καταλήγουμε στις ακόλουθες εξισώσεις μάζας και ορμής:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (2.18)$$

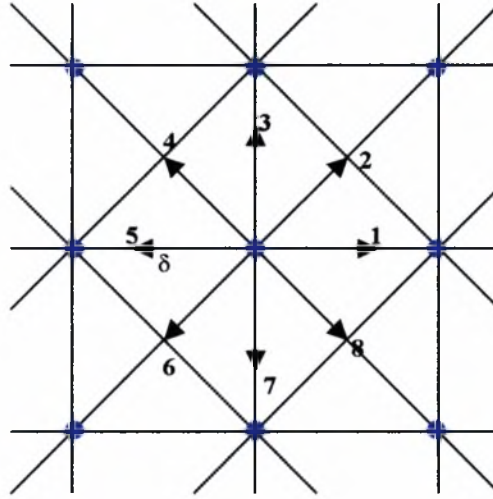
$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \Pi = 0 \quad (2.19)$$

οι οποίες είναι 2^{ης} τάξεως ακρίβειας για την Εξ.(2.2). Το Π (momentum flux tensor) έχει τη μορφή [1, 3 – §3] :

$$\Pi_{\alpha\beta} = \sum_i (\mathbf{e}_i)_\alpha (\mathbf{e}_i)_\beta \left[f_i^{\text{eq}} + \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) f_i^{(1)} \right] \quad (2.20)$$

όπου $(\mathbf{e}_i)_\alpha$ είναι η συνιστώσα του διανύσματος της ταχύτητας \mathbf{e}_i στην α – κατεύθυνση.

Για να ειδικεύσουμε καλύτερα την αναλυτική μορφή του $\Pi_{\alpha\beta}$, θα πρέπει να ορίσουμε τη δομή του πλέγματος και την αντίστοιχη κατανομή ισορροπίας. Για απλότητα και χωρίς να βλάπτουμε τη γενικότητα, θεωρούμε το διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα με 9 ταχύτητες, όπως εικονίζεται στο Σχ.2.1.



Σχήμα 2.1 Τετραγωνικό πλέγμα 9 ταχυτήτων.

Κάθε κόμβος του πλέγματος συνδέεται με τους 8 πλησιέστερους γειτονικούς κόμβους. Τα σωματίδια μπορούν να διαμένουν μόνο πάνω στους κόμβους και να κινούνται κατά μήκος των δεσμών τους προς τους πλησιέστερους γειτονικούς σε κάθε μοναδιαίο χρονικό βήμα. Για το λόγο αυτό, υπάρχουν δύο τύποι κινούμενων σωματιδίων: τα σωματίδια (I) που κινούνται κατά μήκος των αξόνων με ταχύτητα $|\mathbf{e}_1| = 1$ και τα σωματίδια (II) που κινούνται κατά μήκος των διαγώνιων κατευθύνσεων με ταχύτητα $|\mathbf{e}_2| = \sqrt{2}$. Επίσης, κάθε κόμβος διαθέτει σωματίδια σε ηρεμία με μηδενική ταχύτητα $\mathbf{e}_0 = 0$.

Τα διανύσματα των ταχυτήτων δίνονται από τις σχέσεις:

$$\mathbf{e}_0 = 0, \quad (2.21a)$$

$$\mathbf{e}_{Ii} = \left\{ \cos(i-1)\frac{\pi}{2}, \sin(i-1)\frac{\pi}{2} \right\}, \quad i = 1, \dots, 4 \quad (\text{κατευθ. } 1, 3, 5, 7) \quad (2.21b)$$

$$\mathbf{e}_{IIi} = \sqrt{2} \left\{ \cos \left[(i-1)\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right], \sin \left[(i-1)\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right] \right\}, \quad i = 1, \dots, 4 \quad (\text{κατευθ. } 2, 4, 6, 8) \quad (2.21c)$$

Η χρήση του μοντέλου των 9 ταχυτήτων, αντί του απλούστερου τετραγωνικού των 5 ταχυτήτων, γίνεται για τον λόγο της συμμετρίας του πλέγματος: η LBE δεν μπορεί να δώσει τις σωστές εξισώσεις Navier – Stokes εκτός και υπάρχει επαρκής συμμετρία.

Σημειώνουμε ότι οι εξισώσεις Navier – Stokes έχουν μη – γραμμικότητα $2^{\text{ης}}$ τάξεως. Η γενική μορφή της συνάρτησης κατανομής ισορροπίας μπορεί να γραφεί ως [24]:

$$f_i^{eq} = \rho(a + b\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} + c(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 + d u^2) \quad (2.22)$$

όπου τα a, b, c, d αποτελούν σταθερές του πλέγματος. Αυτή η επέκταση είναι σωστή μόνο για μικρές ταχύτητες, ή για μικρούς αριθμούς Mach u/C_s , όπου C_s η ταχύτητα του ήχου. Χρησιμοποιώντας τους περιορισμούς της Εξ.(2.7), οι συντελεστές της Εξ.(2.22) μπορούν να εξαχθούν αναλυτικά [25]:

$$f_i^{eq} = \rho w_i(1 + 3\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} u^2) \quad (2.23)$$

με $w_0 = 4/9$, $w_1 = w_3 = w_5 = w_7 = 1/9$ και $w_2 = w_4 = w_6 = w_8 = 1/36$. Εισάγοντας την παραπάνω εξίσωση στην (2.20), έχουμε:

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(0)} = \sum_i (\mathbf{e}_i)_\alpha (\mathbf{e}_i)_\beta f_i^{eq} = \rho \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \quad (2.24)$$

$$\Pi_{\alpha\beta}^{(1)} = \left(1 - \frac{1}{2\tau}\right) \sum_i (\mathbf{e}_i)_\alpha (\mathbf{e}_i)_\beta f_i^1 = \nu(\nabla_\alpha(\rho u_\beta) + \nabla_\beta(\rho u_\alpha))$$

όπου $p = \rho/3$ η πίεση, η οποία δίνει μια σταθερή ταχύτητα ήχου $C_s = 1/\sqrt{3}$, και ν το κινηματικό ιξώδες ($\nu = \frac{2\tau - 1}{6}$).

Η τελική εξίσωση της ορμής γράφεται:

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}_\alpha}{\partial t} + \nabla_\beta \cdot \mathbf{u}_\alpha \mathbf{u}_\beta \right) = -\nabla_\alpha p + \nu \nabla_\beta \cdot (\nabla_\alpha \rho u_\beta + \nabla_\beta \rho u_\alpha) \quad (2.25)$$

η οποία είναι ακριβώς ίδια με τις εξισώσεις Navier – Stokes, εάν η μεταβολή της πυκνότητας $\delta\rho$ είναι αρκετά μικρή.

Η εξίσωση LBE μπορεί να ληφθεί και από την εξίσωση συνέχειας του Boltzmann για διακριτές ταχύτητες, χρησιμοποιώντας ανάπτυγμα με μικρό αριθμό Mach [39, 40]. Στους υπολογισμούς αυτούς, το σημείο έναρξης είναι η εξίσωση Boltzmann BGK:

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \xi \cdot \nabla g = -\frac{1}{\varepsilon\tau} (g - g^{eq}) \quad (2.26)$$

όπου $g \equiv g(\mathbf{x}, \xi, t)$ η συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων στον συνεχή φυσικό χώρο (\mathbf{x}, ξ) , και g^{eq} είναι η συνάρτηση κατανομής ισορροπίας Maxwell – Boltzmann:

$$g^{eq} \equiv \frac{\rho}{(2\pi/3)^{D/2}} \exp\left[-\frac{3}{2}(\xi - \mathbf{u})^2\right] \quad (2.27)$$

D είναι η χωρική διάσταση, και για απλότητα, η σωματιδιακή ταχύτητα ξ και η ταχύτητα του ρευστού \mathbf{u} κανονικοποιούνται με τη σχέση $\sqrt{3RT}$, δίνοντας μια ταχύτητα ήχου $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$, όπου T η θερμοκρασία. Οι μακροσκοπικές μεταβλητές του ρευστού είναι οι ορμές ταχυτήτων της συνάρτησης κατανομής g :

$$\rho = \int g d\xi, \quad \rho \mathbf{u} = \int \xi g d\xi, \quad \rho \varepsilon = \frac{1}{2} \int (\xi - \mathbf{u})^2 g d\xi \quad (2.28)$$

όπου $\varepsilon = \frac{D}{2}T$ η εσωτερική ενέργεια. Υποθέτοντας ότι η ταχύτητα του ρευστού στην

Εξ.(2.27) είναι μια μικρή παράμετρος (συγκρινόμενη με την ταχύτητα του ήχου), η κατανομή ισορροπίας g^{eq} μέχρι όρους $O(u^2)$ έχει την ακόλουθη μορφή [44]:

$$g^{eq} = \frac{\rho}{(2\pi/3)^{D/2}} \exp\left(-\frac{3}{2}\xi^2\right) \left[1 + 3(\xi \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2}(\xi \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}u^2\right] \quad (2.29)$$

Στα μοντέλα διακριτών ταχυτήτων χρησιμοποιούνται μόνο μια μικρή ομάδα σωματιδιακών ταχυτήτων $\mathbf{e}_i = \xi_i$ ($i = 1, \dots, M$) και οι συναρτήσεις κατανομής τους σε αυτές τις ταχύτητες, $g_i(\mathbf{x}, t) = g(\mathbf{x}, \mathbf{e}_i, t)$. Η κινητική εξέλιξη στην Εξ.(2.26) απαιτεί μόνο τη λύση των g_i . Οι πρώτες δύο Εξ.(2.28) μπορούν να προσεγγιστούν κάνοντας χρήση των διακριτών ταχυτήτων σε ένα τετράγωνο τύπου Gauss:

$$\rho(\mathbf{x}, t) = \sum_i W_i g_i(\mathbf{x}, t), \quad \rho \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \sum_i W_i \mathbf{e}_i g_i(\mathbf{x}, t) \quad (2.30)$$

Αυτό ορίζει μια συνάρτηση κατανομής $f_i(\mathbf{x}, t)$:

$$f_i(\mathbf{x}, t) = W_i g_i(\mathbf{x}, t), \quad (2.31)$$

η οποία ικανοποιεί τις απλές σχέσεις διατήρησης των Εξ.(2.3).

Τα \mathbf{e}_i είναι δεδομένα, τα W_i σταθερά και τα f_i ικανοποιούν την ίδια εξίσωση με την g :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{e}_i \cdot \nabla f_i = -\frac{1}{\varepsilon \tau} (f_i - f_i^{eq}) \quad (2.32)$$

με:

$$f_i^{eq} = w_i \rho \left[1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}u^2\right] \quad (2.33)$$

και:

$$w_i = \frac{W_i}{(2\pi/3)^{D/2}} \exp\left(-\frac{3}{2} \mathbf{e}_i^2\right) \quad (2.34)$$

Για την εύρεση των συντελεστών w_i , χρησιμοποιείται μια εξίσωση 3^{ου} βαθμού Hermite προκειμένου να προσεγγιστούν τα ολοκληρώματα των Εξ.(2.28) [39]. Υποθέτουμε ότι τα w_i έχουν μια απλή περικομμένη συναρτησιακή μορφή βασιζόμενη στα \mathbf{e}_i [40]. Στο τετραγωνικό πλέγμα των 9 ταχυτήτων, βρίσκεται ότι $w_0 = 4/9$, $w_i (i = 1, 3, 5, 7) = 1/9$ και $w_i (i = 2, 4, 6, 8) = 1/36$, όπου παίρνουμε την ίδια συνάρτηση κατανομής ισορροπίας όπως στο πραγματικό πλεγματοτικό μοντέλο Boltzmann της Εξ.(2.23).

Αν στην Εξ.(2.32) η παράγωγος ως προς το χρόνο αντικατασταθεί με μια 1^{ης} τάξεως χρονική διαφορά και χρησιμοποιηθεί μια 1^{ης} τάξεως διακριτοποίηση προς τα πάνω (upwind) στον όρο συναγωγής $\mathbf{e}_i \cdot \nabla f_i$ και προς τα κάτω (downwind) στον όρο σύγκρουσης ($\Omega(\mathbf{x} - \mathbf{e}_i, t)$ αντί $\Omega(\mathbf{x}, t)$), καταλήγουμε στην εξίσωση πεπερασμένων διαφορών των f_i :

$$f_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \alpha [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i(\mathbf{x} - \Delta x \mathbf{e}_i, t)] - \frac{\beta}{\tau} [f_i(\mathbf{x} - \Delta x \mathbf{e}_i, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x} - \Delta x \mathbf{e}_i, t)] \quad (2.35)$$

όπου $\alpha = \Delta t |\mathbf{e}_i| / \Delta x$, $\beta = \Delta t / \varepsilon$ και Δt , Δx είναι το χρονικό και πλεγματοτικό βήμα αντίστοιχα. Επιλέγοντας $\alpha = 1$ και $\beta = 1$, η Εξ.(2.35) καταλήγει στην τυπική εξίσωση LBE όπως περιγράφεται από τη σχέση (2.2).

Από τη διαδικασία διακριτοποίησης, σημειώνουμε ότι η Εξ.(2.35) έχει 1^{ης} τάξεως σύγκλιση ως προς το χώρο και το χρόνο. Ωστόσο, έχει αποδειχθεί [4] ότι επειδή η παραπάνω εξίσωση έχει Lagrangian φύση στη χωρική διακριτοποίηση, το σφάλμα διακριτοποίησης έχει μια ειδική μορφή η οποία μπορεί να συμπεριληφθεί στον όρο ιξώδους, καταλήγοντας σε μια 2^{ης} τάξεως ακρίβεια τόσο στο χώρο όσο και στον χρόνο.

Συνοριακές Συνθήκες στην LBM

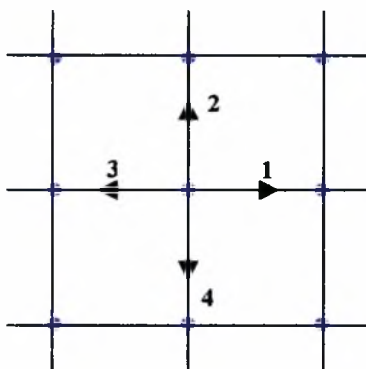
Οι συνοριακές συνθήκες στην LBM προέρχονται από την μέθοδο LG. Για παράδειγμα, για να εξασφαλιστεί η συνθήκη μη - ολίσθησης σε τοίχωμα, χρησιμοποιείται ένα σχήμα αναπήδησης (bounce - back scheme) στη συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων [41, 42]. Όταν λέμε σχήμα αναπήδησης, εννοούμε πως

όταν μια κατανομή σωματιδίων οδεύει προς έναν κόμβο που βρίσκεται πάνω στο τοίχωμα, τότε αυτή διασκορπίζεται προς τα πίσω, προς τον κόμβο απ' όπου προήλθε. Η εύκολη υλοποίηση αυτής της συνθήκης μη – ολίσθησης με τη χρήση του σχήματος αναπήδησης υποστηρίζει την ιδέα πως η LBM είναι ιδανική για την προσομοίωση ροών με πολύπλοκες γεωμετρίες, όπως η ροή σε πορώδες μέσον.

Σε έναν κόμβο κοντά στο σύνορο, μερικοί από τους γειτονικούς κόμβους βρίσκονται έξω από την περιοχή της ροής. Συνεπώς, οι συναρτήσεις κατανομής σε αυτούς τους μη – ολισθαίνοντες κόμβους δεν ορίζονται μοναδικά. Το σχήμα αναπήδησης αποτελεί έναν απλό τρόπο να προσδιορίσουμε αυτές τις άγνωστες κατανομές στον κόμβο πάνω στο τοίχωμα. Απ' την άλλη μεριά, έχει βρεθεί πως η συνθήκη αναπήδησης είναι μόνο $1^{η}$ τάξεως ακρίβειας στα σύνορα [43, 44, 11]. Το γεγονός αυτό υποβιβάζει την LBM {Εξ.(2.2)}, επειδή η αριθμητική ακρίβειά της στους εσωτερικούς κόμβους του πλέγματος είναι $2^{η}$ τάξεως. Αυτό το αποτέλεσμα έχει επιβεβαιωθεί [7] με την ανάλυση της ταχύτητας ολίσθησης κοντά σε κόμβο τοιχώματος στη ροή Poiseuille. Περισσότερες λεπτομέρειες για τη συνθήκη αναπήδησης και την ακρίβειά της αναφέρονται στο επόμενο κεφάλαιο. Ωστόσο, έχουν προταθεί και άλλες πιο πολύπλοκες συνοριακές μέθοδοι που βελτιώνουν την αριθμητική ακρίβεια της LBM.

2.3 Τα πλεγματικά μοντέλα HPP, FHP και το κυβικό πλέγμα 15 ταχυτήτων

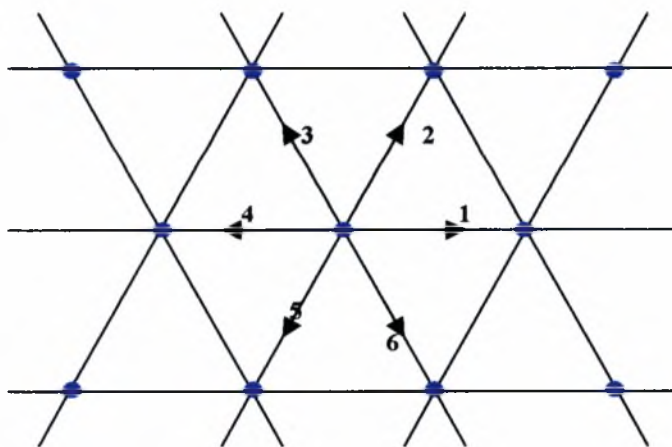
Προηγουμένως είδαμε το διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα 9 ταχυτήτων και τις σχέσεις που ισχύουν γι' αυτό [Εξ.(2.21),Εξ.(2.23)]. Ένα απλούστερο μοντέλο είναι το HPP 5 ταχυτήτων. Ας θεωρήσουμε ένα διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα με μοναδιαίο μήκος μεταξύ των γειτονικών κόμβων, όπως εικονίζεται στο Σχήμα 2.2 .



Σχήμα 2.2 Τετραγωνικό πλέγμα 5 ταχυτήτων (HPP).

Στη μέθοδο Lattice Gas, τα σωματίδια με μοναδιαία μάζα και μοναδιαία ταχύτητα κινούνται κατά μήκος των κομβικών δεσμών και διαμένουν στους κόμβους σε ακέραιες χρονικές στιγμές. Υποθέτουμε ότι δεν επιτρέπονται περισσότερα από ένα σωματίδια σε δεδομένο χρόνο και κόμβο να κινούνται πάνω σε μια δεδομένη κατεύθυνση (απαγορευτική αρχή). Όταν δύο (και μόνο δύο) σωματίδια φτάνουν σε έναν κόμβο από αντίθετες κατευθύνσεις (μετωπική σύγκρουση), τότε αμέσως εγκαταλείπουν τον κόμβο χρησιμοποιώντας τις δύο προηγούμενες ελεύθερες κατευθύνσεις. Αυτοί οι ντετερμινιστικοί κανόνες σύγκρουσης διατηρούν τη μάζα (αριθμό σωματιδίων) και την ορμή, και είναι οι μόνοι σημαντικοί νόμοι με αυτές τις ιδιότητες. Ωστόσο, το μοντέλο HPP δεν χρησιμοποιείται ευρέως λόγω του μικρού πλήθους κατευθύνσεων και της ανεπαρκούς συμμετρίας, επειδή, όπως προαναφέραμε, δεν μπορεί να δώσει τις σωστές εξισώσεις Navier – Stokes.

Ένα άλλο πιο βελτιωμένο μοντέλο είναι το τριγωνικό (ή εξαγωνικό) FHP 7 ταχυτήτων, το οποίο βασίζεται σε ένα διδιάστατο τριγωνικό πλέγμα, όπως εικονίζεται στο Σχήμα 2.3 .



Σχήμα 2.3 Τριγωνικό (ή εξαγωνικό) πλέγμα 7 ταχυτήτων (FHP).

Κάθε κόμβος συνδέεται με τους έξι γειτονικούς του με μοναδιαία διανύσματα ταχύτητας \mathbf{e}_i . Η μάζα και η ταχύτητα κάθε σωματιδίου επιλέγονται μοναδιαίες, όπως και στο προηγούμενο μοντέλο HPP. Η προηγούμενη απαγορευτική αρχή ισχύει και εδώ. Η ταχύτητα και ορμή κάθε σωματιδίου δίνονται απλά από τα διανύσματα \mathbf{e}_i , που υπολογίζονται από τις ακόλουθες σχέσεις:

$$\mathbf{e}_0 = 0, \quad (2.36a)$$

$$\mathbf{e}_i = \left\{ \cos(i-1)\frac{\pi}{3}, \sin(i-1)\frac{\pi}{3} \right\}, \quad i = 1, \dots, 6, \quad (2.36b)$$

$$v = \frac{2\tau - 1}{8} \delta \quad (2.37)$$

Η Εξ. (2.37) συνδέει το κινηματικό ιξώδες ν με το χρόνο χαλάρωσης (relaxation time) τ . Η σχέση που μας δίνουν τα f^{eq} είναι οι ακόλουθες:

$$f_0^{eq} = d_0 - \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = \alpha \rho - \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$$

$$f_i^{eq} = d + \frac{1}{3} \rho [(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + 2(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}] \quad (2.38)$$

όπου α μια ρυθμιζόμενη παράμετρος, ρ η πυκνότητα και $d = (\rho - d_0)/6$.

Η σχετική διάταξη των σωματιδίων εξελίσσεται με μια διαδοχή διακριτών χρονικών βημάτων. Η ανανέωση της διάταξης των σωματιδίων προχωράει σε δύο εναλλακτικά βήματα: διάδοση (propagation) [ή ροή (streaming)] και συγκρούσεις (collisions). Όλα τα σωματίδια στα μοντέλα HPP και FHP έχουν την ίδια κινητική ενέργεια και μηδενική δυναμική ενέργεια. Οι συγκρούσεις διατηρούν τη μάζα και την ορμή τοπικά. Σημειώνουμε ότι η διατήρηση της ενέργειας είναι ισοδύναμη με τη διατήρηση της μάζας σε αυτά τα μοντέλα. Η δυναμική του μοντέλου FHP είναι σταθερή κάτω απ' όλους τους ακόλουθους μετασχηματισμούς: μετασχηματισμός συντεταγμένων, περιστροφή κατά $\pi/3$, και κατοπτρικές συμμετρίες ως προς κάποια ευθεία του πλέγματος.

Σε τριδιάστατα προβλήματα χρησιμοποιείται συνήθως το κυβικό πλέγμα 15 ταχυτήτων, το οποίο εικονίζεται στο Σχήμα 2.4. Κάθε κόμβος συνορεύει με 14 γειτονικούς κόμβους, με τους οποίους συνδέεται. Υπάρχουν και εδώ δύο τύποι κινούμενων σωματιδίων: τα σωματίδια (I) που κινούνται κατά μήκος των αξόνων με ταχύτητα $|\mathbf{e}_i| = 1$ και τα σωματίδια (II) που κινούνται κατά μήκος των διαγώνιων κατευθύνσεων με ταχύτητα $|\mathbf{e}_i| = \sqrt{3}$. Επίσης, κάθε κόμβος διαθέτει σωματίδια σε ηρεμία με μηδενική ταχύτητα $\mathbf{e}_0 = 0$. Οι συντεταγμένες τους είναι:

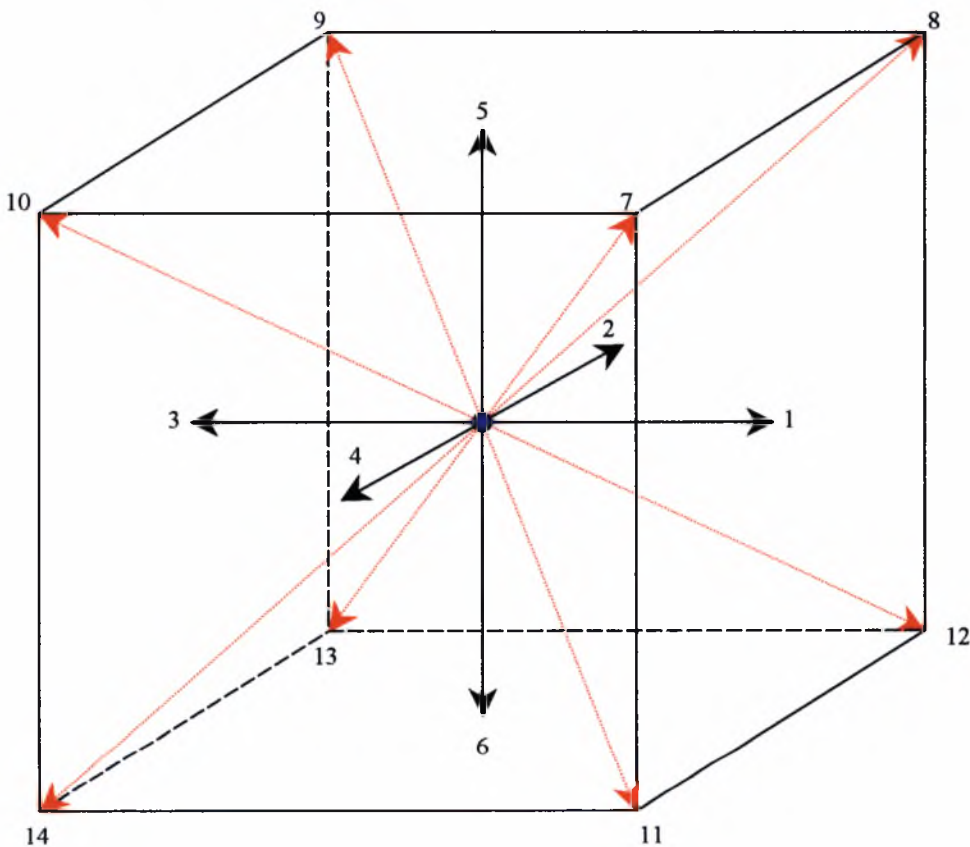
$\mathbf{e}_i^I \in (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)$ και $\mathbf{e}_i^II \in (\pm 1, \pm 1, \pm 1)$. Οι σχέσεις που ισχύουν για τα f^{eq} είναι οι ακόλουθες:

$$f_0^{eq} = \frac{2}{9} \rho \left[1 - \frac{3}{2} u^2 \right] \quad (2.38a)$$

$$f_{1i}^{eq} = \frac{1}{9} \rho \left[1 + 3(\mathbf{e}_{1i} \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_{1i} \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} u^2 \right] \quad (2.38b)$$

$$f_{2i}^{eq} = \frac{1}{72} \rho \left[1 + 3(\mathbf{e}_{2i} \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_{2i} \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} u^2 \right] \quad (2.38c)$$

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \delta \quad (2.39)$$



Σχήμα 2.4 Κυβικό πλέγμα 15 κατευθύνσεων.

Πρέπει να σημειώσουμε για το παραπάνω κυβικό πλέγμα 15 κατευθύνσεων πως πέρα από τους κόμβους που υπάρχουν και δεικνύονται με το πέρας κάθε διανύσματος

κατεύθυνσης, υπάρχουν κόμβοι και στο μέσο κάθε ακμής του κύβου. Ο κεντρικός κόμβος όμως δεν συνδέεται με αυτούς στο συγκεκριμένο μοντέλο. Εξέλιξη του μοντέλου αυτού αποτελεί το κυβικό πλέγμα 27 κατευθύνσεων, όπου ο κεντρικός κόμβος συνδέεται με όλους τους γειτονικούς, και διέπεται από διαφορετικές εξισώσεις όσον αφορά τον χρόνο χαλάρωσης και τις εξισ. κατανομής ισορροπίας.

Τα παραπάνω πλέγματα χρησιμοποιούνται στις περισσότερες προσομοιώσεις, ωστόσο υπάρχουν και άλλα που αποτελούν παραλλαγές των παραπάνω, με διαφορετικό αριθμό κατευθύνσεων. Στους υπολογισμούς που ακολουθούν στα επόμενα κεφάλαια γίνεται χρήση των παραπάνω πλεγμάτων.

Σημειώνουμε πως πέρα από τα πλέγματα που χρησιμοποιούν καρτεσιανές συντεταγμένες, έχουν αναπτυχθεί και άλλα πλέγματα όπου γίνεται χρήση πολικών και κυλινδρικών συντεταγμένων [26, 27].

Προς αποφυγή δυσνόησης, πρέπει να πούμε πως οι παραπάνω σχέσεις (διανύσματα ταχυτήτων, σχέση $\tau - \nu$, εξισώσεις κατανομής ισορροπίας, ταχύτητα του ήχου) που διέπουν κάθε μοντέλο πλέγματος έχουν γραφεί στην απλοποιημένη μορφή τους, και κατ' αυτό τον τρόπο χρησιμοποιούνται τις περισσότερες φορές στις προσομοιώσεις. Η ολοκληρωμένη τους μορφή, για το τετραγωνικό πλέγμα για παράδειγμα, είναι η ακόλουθη [7]:

διανύσματα ταχυτήτων:

$$\mathbf{e}_0 = 0, \quad (2.40a)$$

$$\mathbf{e}_{II} = \left\{ \cos(i-1)\frac{\pi}{2}, \sin(i-1)\frac{\pi}{2} \right\} c, \quad i = 1, \dots, 4 \quad (\text{κατευθ. } 1, 3, 5, 7) \quad (2.40b)$$

$$\mathbf{e}_{III} = \sqrt{2} \left\{ \cos \left[(i-1)\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right], \sin \left[(i-1)\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{4} \right] \right\} c, \quad i = 1, \dots, 4 \quad (\text{κατευθ. } 2, 4, 6, 8) \quad (2.40c)$$

όπου $c = \frac{\delta_x}{\delta_t}$ η σταθερά που ορίζεται από το λόγο της πλεγματικής σταθεράς δ_x

(απόσταση δύο διαδοχικών κόμβων δ , βλ. Σχ. 2.1) προς το χρονικό βήμα δ_t .

σχέση $\tau - \nu$:

$$\nu = \frac{(2\tau - 1)}{6} \frac{\delta_x^2}{\delta_t} \quad (2.41)$$

εξισώσεις κατανομής ισορροπίας:

$$f_i^{\text{eq}} = \rho w_i \left[1 + 3 \left(\frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c^2} \right) + \frac{9}{2} \left(\frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c^2} \right)^2 - \frac{3}{2} \left(\frac{\mathbf{u}}{c} \right)^2 \right] \quad (2.42)$$

με $w_0 = 4/9$, $w_1 = w_3 = w_5 = w_7 = 1/9$ και $w_2 = w_4 = w_6 = w_8 = 1/36$

ταχύτητα του ήχου:

$$c_s = \frac{1}{\sqrt{3}} c \quad (2.43)$$

Αντίστοιχα τροποποιούνται και οι σχέσεις που ισχύουν για τα άλλα πλεγματικά μοντέλα. Στις προσομοιώσεις συνηθίζεται να επιλέγεται $\delta_x = \delta_t$, οπότε $c = 1$, και χρησιμοποιείται η απλοποιημένη μορφή των παραπάνω σχέσεων. Περαιτέρω απλοποίηση προκύπτει αν θεωρήσουμε $\delta_x = \delta_t = 1$ (εφαρμογή αυτού έγινε στην διδιάστατη ροή σε κοιλότητα που παρουσιάζεται στο Κεφ. 5).

Κεφάλαιο 3.

Αναλυτικές λύσεις των ροών Poiseuille και Couette

3.1 Εισαγωγή

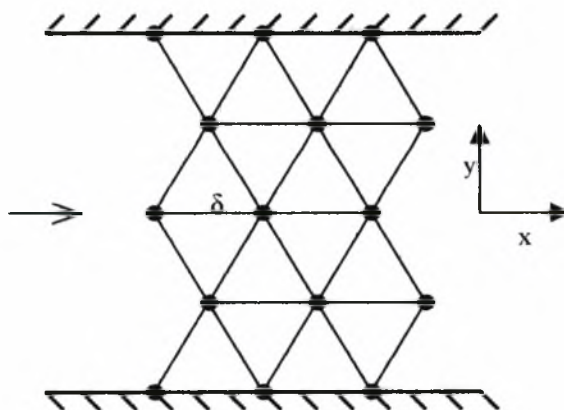
Οι αναλυτικές λύσεις των διδιάστατων Lattice Boltzmann BGK μοντέλων (τριγωνικού και τετραγωνικού πλέγματος) έχουν επιτευχθεί για την επίπεδη ροή Poiseuille και την επίπεδη ροή Couette [6, 7]. Οι λύσεις αυτές είναι γραμμένες σε όρους της χαρακτηριστικής ταχύτητας της ροής, του απλού χρόνου χαλάρωσης τ (single relaxation time), και της πλεγματικής απόστασης (lattice spacing). Οι αναλυτικές λύσεις αποτελούν την ακριβή αναπαράσταση των δύο παραπάνω ροών χωρίς καμία απολύτως προσέγγιση. Χρησιμοποιώντας την αναλυτική λύση, είναι φανερό πως στην ροή Poiseuille η συνοριακή συνθήκη αναπήδησης (bounce – back boundary condition) εισάγει ένα σφάλμα $1^{\text{ης}}$ τάξεως στην πλεγματική απόσταση. Η συνοριακή συνθήκη που χρησιμοποιήθηκε από τον Kadanoff για την προσομοίωση της ροής Poiseuille με τη μέθοδο Lattice Gas Automata, μελετάται και στην περίπτωση του τριγωνικού Lattice Boltzmann BGK μοντέλου. Επιτυγχάνεται μια αναλυτική λύση και χρησιμοποιείται για να δείξει ότι η συνοριακή συνθήκη εισάγει ένα σφάλμα $2^{\text{ης}}$ τάξεως στην πλεγματική απόσταση.

Τα αναλυτικά αυτά αποτελέσματα μας παρέχουν μια επίγνωση για εφαρμογές αυτών των μεθόδων, βοηθώντας την καλύτερη κατανόησή τους. Για παράδειγμα, τα αναλυτικά αποτελέσματα επιτρέπουν τον υπολογισμό του ιξώδους από δεδομένους κανόνες σύγκρουσης και την εκτίμηση, όπως επίσης και τη βελτίωση, συνοριακών συνθηκών αναπήδησης (bounce – back boundary conditions) στην LGA. Εντούτοις,

αναλυτικές λύσεις σε πραγματικές ροές με σύνορα όπως η ροή Poiseuille, η οποία αναπαριστάται ακριβώς από ένα $2^{η5}$ τάξεως σχήμα πεπερασμένων διαφορών με ομοιόμορφο πλέγμα, δεν είχαν επιτευχθεί προηγουμένως για την LGA ή LBE Ένας λόγος ίσως είναι ότι οι συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιούν οι παραπάνω μέθοδοι δεν είναι οι ακριβείς. Για παράδειγμα, η συνθήκη αναπήδησης ή ένας συνδυασμός αυτής με την κατοπτρική ανάκλαση (specular reflection) [28] για τη μοντελοποίηση του συνόρου μη – ολίσθησης (nonslip boundary) αποτελούν μόνο προσεγγίσεις. Το αποτελεσματικό σύνορο μη – ολίσθησης βρίσκεται εσωτερικά της γραμμής αναπήδησης (bounce – back row) [28, 45]. Σχετικά πρόσφατα, ο Noble [14] πρότεινε μια συνοριακή συνθήκη για το μοντέλο LBGK στο τριγωνικό πλέγμα. Όταν αυτή η συνθήκη εφαρμόστηκε στην επίπεδη ροή Poiseuille, η λύση σε μόνιμες συνθήκες της συνάρτησης κατανομής έδωσε ένα παραβολικό προφίλ ταχυτήτων με ακρίβεια μεγαλύτερη της ακρίβειας μηχανής. Το αποτέλεσμα υποδήλωνε την ύπαρξη αναλυτικής λύσης στο LBGK, η οποία αποτελεί ακριβή αναπαράσταση της ροής Poiseuille. Στο κεφάλαιο αυτό, οι αναλυτικές λύσεις των επίπεδων ροών Poiseuille και Couette εξάγονται στο τριγωνικό και τετραγωνικό πλέγμα.

3.2 Αναλυτική λύση της ροής Poiseuille σε τριγωνικό πλέγμα (FHP model)

Ας θεωρήσουμε πρώτα το τριγωνικό πλέγμα (FHP model) της μεθόδου Lattice Boltzmann. Για τη ροή σε ένα κανάλι, το τριγωνικό πλέγμα κατασκευάζεται όπως δείχνει το Σχήμα 3.1. Υπενθυμίζουμε ότι υπάρχουν δύο τύποι σωματιδίων σε κάθε κόμβο του μοντέλου FHP: τα σωματίδια σε ηρεμία (rest particles, type 0) με $e_0 = 0$



Σχήμα 3.1 Η γεωμετρία της επίπεδης ροής σε κανάλι.

και τα κινούμενα σωματίδια (types 1 – 6) με μοναδιαία διανύσματα ταχυτήτων $\mathbf{e}_i = (\cos [(i - 1) \pi/3], \sin [(i - 1) \pi/3], i = 1, \dots, 6)$ κατά μήκος των 6 κατευθύνσεων. Θεωρούμε τη συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων $f_i(\mathbf{x}, t)$ η οποία αντιστοιχεί στην πιθανότητα να βρεθεί ένα σωματίδιο στον κόμβο $\mathbf{x} = (x, y)$ τη χρονική στιγμή t και με ταχύτητα \mathbf{e}_i . Η εξίσωση εξέλιξης (evolution equation) των f_i του μοντέλου BGK δίνεται από τη σχέση:

$$f_i(\mathbf{x} + \delta \mathbf{e}_i, t + \delta) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)], \quad i = 0, 1, \dots, 6 \quad (3.1)$$

όπου $f_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)$ είναι η κατανομή ισορροπίας των σωματιδίων τύπου i στον κόμβο \mathbf{x} και τη χρονική στιγμή t , το δεξιό μέλος της εξίσωσης αντιπροσωπεύει τον όρο σύγκρουσης (collision term) και τ είναι ο απλός χρόνος χαλάρωσης (single relaxation time) ο οποίος ελέγχει το ρυθμό προσέγγισης της ισορροπίας. Η πυκνότητα ανά κόμβο, ρ , και η μακροσκοπική ταχύτητα της ροής, \mathbf{u} , ορίζονται με όρους της συνάρτησης κατανομής των σωματιδίων ως:

$$\sum_{i=0}^6 f_i = \rho, \quad \sum_{i=1}^6 f_i \mathbf{e}_i = \rho \mathbf{u} \quad (3.2)$$

Οι συναρτήσεις κατανομής ισορροπίας εξαρτώνται μόνο από την τοπική πυκνότητα και ταχύτητα. Μια κατάλληλη κατανομή ισορροπίας για το μοντέλο FHP μπορεί να έχει την ακόλουθη μορφή:

$$f_0^{(0)} = d_0 - \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = \alpha \rho - \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$$

$$f_i^{(0)} = d + \frac{1}{3} \rho [(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + 2(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{1}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}], \quad i = 1, \dots, 6 \quad (3.3)$$

όπου α είναι μια ρυθμιζόμενη παράμετρος, $d = (\rho - d_0)/6$ και $\sum_{i=0}^6 f_i^{(0)} = \rho$,

$\sum_{i=1}^6 f_i^{(0)} \mathbf{e}_i = \rho \mathbf{u}$. Σημειώνουμε ότι η Εξ.(3.1) είναι γραμμένη σε φυσικές μονάδες με το μήκος του πλεγματού δεσμού να είναι δ . Χρησιμοποιώντας μοναδιαία ταχύτητα για τα σωματίδια (με μοναδιαίο φυσικό χρόνο), ένα χρονικό βήμα έχει τιμή δ . Μπορεί να εφαρμοστεί στην Εξ.(3.1) μια διαδικασία Chapman – Enskog προκειμένου να παραχθούν οι μακροσκοπικές εξισώσεις του μοντέλου. Αυτές δίνονται από την εξίσωση της συνέχειας [με τον όρο σφάλματος $O(\delta^2)$ να παραλείπεται]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.4)$$

και την εξίσωση της ορμής [με τους όρους $O(\delta^2)$ και $O(\delta u^3)$ να παραλείπονται]:

$$\partial_t(\rho \mathbf{u}_a) + \partial_\beta(\rho \mathbf{u}_a \mathbf{u}_\beta) = -\partial_\alpha(c_s^2 \rho) + \partial_\beta(2\nu \rho S_{\alpha\beta}) \quad (3.5)$$

όπου $S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha)$ η σύμβαση αθροίσματος του Einstein, η πίεση δίνεται από

τη σχέση $p = c_s^2 \rho$, όπου c_s η ταχύτητα του ήχου με $c_s^2 = (1 - \alpha)/2$ και $\nu = [(2\tau - 1)/8]\delta$, όπου ν το κινηματικό ιξώδες. Οι μακροσκοπικές εξισώσεις LBGK αντιπροσωπεύουν τις εξισώσεις ασυμπίεστης ροής Navier – Stokes στο όριο καθώς $\delta \rightarrow 0$, $\rho \rightarrow \rho_0$ (μια σταθερά) και ο αριθμός Mach προσεγγίζει την τιμή 0.

Η επίπεδη ροή Poiseuille σε ένα κανάλι πλάτους $2L$ και με ταχύτητα $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ περιγράφεται από τις σχέσεις:

$$u_x = u_0 \left(1 - \frac{y^2}{L^2}\right), \quad u_y = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial x} = -G, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (3.6)$$

όπου G είναι μια σταθερά που σχετίζεται με τη χαρακτηριστική ταχύτητα u_0 σύμφωνα με τη σχέση:

$$G = 2 \rho \nu u_0 / L^2 \quad (3.7)$$

και η πυκνότητα της ροής ρ είναι σταθερή. Αυτή αποτελεί μια ακριβή λύση των εξισώσεων Navier – Stokes για ασυμπίεστη ροή:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{u} &= 0 \\ -\partial_\alpha p + \mu \partial_{\beta\beta} u_\alpha &= 0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

(ή απλούστερα: $-\frac{dp}{dx} + \mu \frac{d^2 u}{dx^2} = 0$)

όπου $\mu = \rho\nu$. Χωρίς να βλάπτουμε τη γενικότητα, υποθέτουμε $L = 1$ ($y' = y/L \Rightarrow y' \in [-1, 1]$). Για να υπολογίσουμε τη ροή Poiseuille χρησιμοποιώντας το μοντέλο Lattice Boltzmann, είναι βολικό να αντικαταστήσουμε το σταθερό ∇ με μια σωματική δύναμη \mathbf{g} έτσι ώστε $\rho \mathbf{g} = -\nabla p$. Η εξίσωση ορμής των NS με μια σωματική δύναμη, γράφεται:

$$-\partial_\alpha p + \mu \partial_{\beta\beta} u_\alpha + \rho g_\alpha = 0 \quad (3.9)$$

(ή απλούστερα: $-\frac{dp}{dx} + \mu \frac{d^2 u}{dx^2} + \rho g_x = 0$)

Η ροή Poiseuille προκαλείται από την επίδραση σωματικής δύναμης $\rho g_x = G$, $g_y = 0$, όπου η πίεση διατηρείται σταθερή. Η LBGK, η οποία ενσωματώνει τη σωματική δύναμη, είναι μια τροποποίηση της Εξ.(3.1) και δίνεται από τη σχέση:

$$f_i(\mathbf{x} + \delta \mathbf{e}_i, t + \delta) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)] + \delta h_i \quad i = 0, 1, \dots, 6 \quad (3.10)$$

όπου οι συντελεστές h_i επιλέγονται ως:

$$h_0 = 0 \quad h_i = \frac{1}{4} G, i = 1, 2, 6 \quad h_i = -\frac{1}{4} G, i = 3, 4, 5 \quad (3.11)$$

έτσι ώστε να ικανοποιούνται οι εξισώσεις:

$$\sum_i h_i = 0 \Rightarrow h_0 + h_1 + h_2 + h_3 + h_4 + h_5 + h_6 = 0 \quad (3.12)$$

$$\sum_i h_i \mathbf{e}_i = \rho \mathbf{g} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \sum_i h_i \mathbf{e}_{ix} = G \Rightarrow h_1 + \frac{1}{2} h_2 - \frac{1}{2} h_3 - h_4 - \frac{1}{2} h_5 + \frac{1}{2} h_6 = G \\ \sum_i h_i \mathbf{e}_{iy} = 0 \Rightarrow \frac{\sqrt{3}}{2} h_2 + \frac{\sqrt{3}}{2} h_3 - \frac{\sqrt{3}}{2} h_5 - \frac{\sqrt{3}}{2} h_6 = 0 \end{array} \right\} \quad (3.13)$$

$$\sum_i h_i \mathbf{e}_{ia} \mathbf{e}_{ib} = 0 \Rightarrow h_1 + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right) h_2 + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right) h_3 + h_4 + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right) h_5 + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} + 1 \right) h_6 = 0 \quad (3.14)$$

$$h_0 = 0 \quad (3.15)$$

Έστω ότι υπάρχει μια λύση $f_i(\mathbf{x}, t)$ της Εξ.(3.10) και περιγράφει ακριβώς τη ροή Poiseuille. Υποθέτουμε τις ακόλουθες ιδιότητες:

- I1. Η $f_i(\mathbf{x}, t)$ είναι σταθερή (ανεξάρτητη του χρόνου t).
- I2. Η $f_i(\mathbf{x}, t)$ είναι ανεξάρτητη του x , γι' αυτό το λόγο είναι συνάρτηση μόνο του y και δηλώνεται ως $f_i(y)$.
- I3. Από τη συμμετρία της ροής έχουμε $f_2(y) = f_6(-y)$ και $f_3(y) = f_5(-y)$
- I4. $\sum_i f_i(y) = \rho$ (σταθερό)
- I5. $\sum_i f_i(y) \mathbf{e}_{ix} = \rho u_x(y)$, όπου $u_x(y) = u_0(1 - y^2)$ ($L = 1$) [Εξισώσεις(3.16)]
- I6. $\sum_i f_i(y) \mathbf{e}_{iy} = 0$

Από τις Εξ.(3.3) παίρνουμε αναλυτικά:

$$\begin{aligned} f_0^{(0)} &= d_0 - \rho u^2, \{u = u_0(1 - y^2)\} \\ f_1^{(0)} &= d + \frac{1}{3} \rho u + \frac{1}{2} \rho u^2 \\ f_2^{(0)} &= d + \frac{1}{6} \rho u \\ f_3^{(0)} &= d - \frac{1}{6} \rho u \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$f_4^{(0)} = d - \frac{1}{3}\rho u + \frac{1}{2}\rho u^2$$

$$f_5^{(0)} = d - \frac{1}{6}\rho u$$

$$f_6^{(0)} = d + \frac{1}{6}\rho u$$

Από τις ιδιότητες I1, I2 και την Εξ. (3.10), για $i = 0$ παίρνουμε:

$$f_0(y) = f_0(y) - \frac{1}{\tau} [f_0(y) - f_0^{(0)}(y)] \Rightarrow f_0(y) = f_0^{(0)}(y) = d_0 - \rho u^2 \quad (3.18a)$$

Όμοια, για $i = 1$ και $i = 4$ παίρνουμε αντίστοιχα:

$$f_1(y) = f_1(y) - \frac{1}{\tau} [f_1(y) - f_1^{(0)}(y)] + \delta h_1 \Rightarrow f_1(y) = f_1^{(0)}(y) + \tau \delta \frac{G}{4} \quad (3.18b)$$

$$f_4(y) = f_4(y) - \frac{1}{\tau} [f_4(y) - f_4^{(0)}(y)] + \delta h_4 \Rightarrow f_4(y) = f_4^{(0)}(y) - \tau \delta \frac{G}{4} \quad (3.18c)$$

Είναι φανερό πως τα f_0, f_1, f_4 είναι συναρτήσεις των y^2, y^4 επειδή εξαρτώνται από τα u, u^2 . Για να βρούμε τις υπόλοιπες σχέσεις των $f_i(y)$, παρατηρούμε ότι οι $f_i^{(0)}, i = 2, 3, 5, 6$ δεν έχουν όρους u^2 , οπότε είναι συναρτήσεις μόνο του y^2 , έτσι προτείνεται η ακόλουθη μορφή:

$$f_i(y) = a_i + b_i y + c_i y^2, \quad i = 2, 3, 5, 6 \quad (3.19)$$

όπου οι 12 άγνωστοι συντελεστές a_i, b_i, c_i εξαρτώνται από τα μεγέθη που περιγράφουν τη ροή (τ, dy) εκτός του y .

Χρησιμοποιώντας την ιδιότητα I3, παίρνουμε:

$$f_2(y) = f_6(-y) \Rightarrow a_2 + b_2 y + c_2 y^2 = a_6 - b_6 y + c_6 y^2$$

Επειδή η σχέση αυτή πρέπει να ισχύει για κάθε y , προκύπτει:

$$(a_6 = a_2, b_6 = -b_2, c_6 = c_2) \quad (3.20a)$$

όμοια:

$$f_3(y) = f_5(-y) \Rightarrow a_3 + b_3 y + c_3 y^2 = a_5 - b_5 y + c_5 y^2$$

$$\Rightarrow (a_5 = a_3, b_5 = -b_3, c_5 = c_3) \quad (3.20b)$$

Από την ιδιότητα I6 βρίσκουμε:

$$\frac{\sqrt{3}}{2}f_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}f_3 - \frac{\sqrt{3}}{2}f_5 - \frac{\sqrt{3}}{2}f_6 = 0 \Rightarrow (a_2 + a_3 - a_5 - a_6) + (b_2 + b_3 - b_5 - b_6)y + (c_2 + c_3 - c_5 - c_6)y^2 = 0 \xrightarrow{10a,10b} 2b_2y + 2b_3y = 0 \Rightarrow b_3 = -b_2$$
(3.21)

Από την ιδιότητα I4 και τις ισότητες (3.20) έχουμε:

$$(f_0 + f_1 + f_4) + 2(a_2 + a_3) + 2(c_2 + c_3)y^2 = \rho \Rightarrow (d_0 + 2d) + 2(a_2 + a_3) + 2(c_2 + c_3)y^2 = \rho$$

οπότε:

$$a_2 + a_3 = 2d \Rightarrow a_3 = 2d - a_2 \quad (3.22a)$$

$$c_3 = -c_2 \quad (3.22b)$$

Από την ιδιότητα I5 παίρνουμε:

$$f_1 + \frac{1}{2}f_2 - \frac{1}{2}f_3 - f_4 - \frac{1}{2}f_5 + \frac{1}{2}f_6 = \rho u \Rightarrow \frac{1}{2}(a_2 - a_3 - a_5 + a_6) + \frac{1}{2}(b_2 - b_3 - b_5 + b_6)y + \frac{1}{2}(c_2 - c_3 - c_5 + c_6)y^2 = \frac{1}{3}\rho u - \tau\delta \frac{G}{2}$$

$$\xrightarrow{10a,10b,12b} (a_2 - a_3) + 2c_2y^2 = \left(\frac{1}{3}\rho u_0 - \tau\delta \frac{G}{2}\right) - \frac{1}{3}\rho u_0y^2$$

Χρησιμοποιώντας και την ισότητα (3.22a) παίρνουμε:

$$a_2 = \frac{1}{6}\rho u_0 + d - \tau\delta \frac{G}{4} \quad (3.23a)$$

$$c_2 = -\frac{1}{6}\rho u_0 \quad (3.23b)$$

Στο σημείο αυτό, μόνο το b_2 παραμένει άγνωστο. Χρησιμοποιώντας την εξίσωση (3.10) για $i = 2$, έχουμε:

$$f_2(y + dy) = f_2(y) - \frac{1}{\tau}(f_2(y) - f_2^{(0)}(y)) + \frac{1}{4}G\delta \quad (3.24)$$

όπου $dy = \frac{\sqrt{3}}{2}\delta$ η κατακόρυφη απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών οριζόντιων γραμμών του πλέγματος. Τοποθετώντας τις εκφράσεις $f_2, f_2^{(0)}$ στην παραπάνω σχέση προκύπτει:

$$c_2[y^2 + 2ydy + (dy)^2] + b_2y + b_2dy + a_2 = \left(1 - \frac{1}{\tau}\right)(c_2y^2 + b_2y + a_2) + \frac{1}{\tau}\left[d + \frac{1}{6}\rho u_0(1 - y^2)\right] + \frac{1}{4}\delta G$$

Παραγοντοποιώντας ως προς y , παίρνουμε:

$$b_2 = -2\tau c_2 dy = \frac{1}{3}\tau u_0 dy \quad (3.25)$$

ενώ οι ιδιότητες για τους συντελεστές των y , y^2 ικανοποιούνται.

Συνοψίζοντας τα αποτελέσματα, καταλήγουμε στις τελικές σχέσεις:

$$\begin{aligned} f_0 &= d_0 - \rho u^2, \{u = u_0(1 - y^2)\} \\ f_1 &= d + \frac{1}{3}\rho u + \frac{1}{2}\rho u^2 + \tau\delta \frac{G}{4} \\ f_2 &= d - \frac{1}{6}\rho u_0 y^2 + \frac{1}{3}\tau\rho u_0 y dy + \frac{1}{6}\rho u_0 - \tau\delta \frac{G}{4} \\ f_3 &= d + \frac{1}{6}\rho u_0 y^2 - \frac{1}{3}\tau\rho u_0 y dy - \frac{1}{6}\rho u_0 + \tau\delta \frac{G}{4} \\ f_4 &= d - \frac{1}{3}\rho u + \frac{1}{2}\rho u^2 - \tau\delta \frac{G}{4} \\ f_5 &= d + \frac{1}{6}\rho u_0 y^2 + \frac{1}{3}\tau\rho u_0 y dy - \frac{1}{6}\rho u_0 + \tau\delta \frac{G}{4} \\ f_6 &= d - \frac{1}{6}\rho u_0 y^2 - \frac{1}{3}\tau\rho u_0 y dy + \frac{1}{6}\rho u_0 - \tau\delta \frac{G}{4} \end{aligned} \quad (3.26)$$

οι οποίες ικανοποιούν τις ιδιότητες I1→I6 και μαζί με τις σχέσεις (3.17) ικανοποιούν την Εξ. LBGK (3.10). Έτσι, περιγράφουν ακριβώς τη ροή Poiseuille στην περιοχή όπου $y \in [-1, 1]$.

Θα εξετάσουμε τώρα σε τι συνοριακές συνθήκες αντιστοιχεί η λύση που πήραμε στις εξισώσεις (3.26). Θεωρώντας την κάτω συνοριακή συνθήκη με $y = -1$, $u = 0$, παίρνουμε:

$$\begin{aligned} f_0 &= d_0, & f_1 &= d + \frac{\tau\delta G}{4}, & f_4 &= d - \frac{\tau\delta G}{4} \\ f_2 &= -\frac{1}{3}\tau\rho u_0 dy + d - \frac{\tau\delta G}{4}, & f_3 &= +\frac{1}{3}\tau\rho u_0 dy + d + \frac{\tau\delta G}{4} \\ f_5 &= -\frac{1}{3}\tau\rho u_0 dy + d + \frac{\tau\delta G}{4}, & f_6 &= +\frac{1}{3}\tau\rho u_0 dy + d - \frac{\tau\delta G}{4} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Είναι φανερό ότι στον πυθμένα, μετά την σύγκρουση, ισχύει: $f_2 = f_5 - 2\frac{\tau\delta G}{4}$,

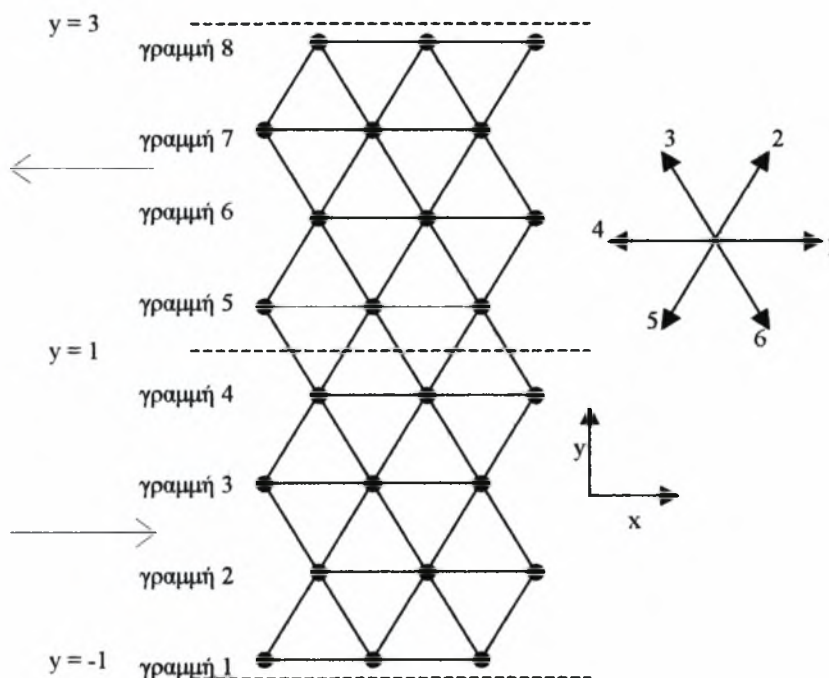
$f_3 = f_6 + 2\frac{\tau\delta G}{4}$. Έτσι, αν εφαρμοστεί συνθήκη αναπήδησης (bounce – back boundary

condition) στον πυθμένα με $f_2 = f_3$, $f_3 = f_6$ για να αναπληρώσει το βήμα σύγκρουσης και εξαναγκασμού (collision & forcing step), το σφάλμα είναι τάξεως δ . Το γεγονός αυτό δείχνει ότι η συνοριακή συνθήκη αναπήδησης είναι ακρίβειας 1^{75} τάξεως.

Για να λάβουμε τη λύση σε μόνιμες συνθήκες στην προσομοίωση LBGK, η συνοριακή συνθήκη πρέπει να επιλεγεί κατάλληλα. Η συνοριακή συνθήκη που προτάθηκε από τον Noble αποτελεί μια σωστή επιλογή. Εάν εξετάσουμε έναν κόμβο B στον πυθμένα, μετά τη ροή (μετατόπιση σωματιδίων, streaming), τα f_2 και f_3 είναι κενά στον κόμβο B αφού κανένα σωματίδιο δεν έρχεται απ' έξω. Έπειτα, οι Εξ.(3.2) με $u_x = u_y = 0$ χρησιμοποιούνται για να υπολογίσουμε τα ρ , f_2 , f_3 . Κατόπιν, η ομαλή σύγκρουση με δύναμη όπως δίνεται από την Εξ.(3.10) εφαρμόζεται στα f_i πάνω στα σύνορα. Υποθέτουμε ότι αρχικά χρησιμοποιούμε ομοιόμορφη πυκνότητα ρ_0 και μηδενική ταχύτητα σε όλο το πεδίο ροής· έπειτα υπολογίζουμε τα $f_i^{(0)}(0)$ και θέτουμε $f_i = f_i^{(0)}$ σε όλο το πεδίο. Εφόσον δεν υφίστανται κλίσεις πίεσης, είναι φυσικό ότι η πυκνότητα σε κάθε κόμβο θα παραμένει σταθερή (ρ_0) (επιβεβαιωμένο από προσομοιώσεις). Συνεπώς, οι Εξ. (3.2) μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εύρεση των μοναδικών f_2 , f_3 , με τη σωστή πυκνότητα και ταχύτητα, γι' αυτό το λόγο είναι σύμφωνες με τον υπολογισμό των f_2 , f_3 στην αναλυτική λύση. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων δείχνουν ότι η αριθμητική λύση με τη συγκεκριμένη συνοριακή συνθήκη προσεγγίζει την αναλυτική λύση καθώς το $\tau \rightarrow \infty$.

Σημειώνουμε ότι η λύση που δίνεται από τις Εξ.(3.26) ικανοποιεί την εξίσωση LBGK (10) για κάθε y και μια x – ταχύτητα ίση με $u_0(1 - y^2)$. Στην περιοχή $y \in [-1, 1]$ εκφράζει τη ροή Poiseuille. Η ροή μπορεί να επεκταθεί και πέρα της περιοχής $y \in [-1, 1]$ με το δεδομένο παραβολικό προφίλ ταχύτητας $u_0(1 - y^2)$. Στην εργασία του Kadanoff εφαρμόζεται μια ειδική πραγμάτευση του προβλήματος (τετραγωνικός κυματικός εξαναγκασμός – square wave forcing) στη μέθοδο LGA για να προσομοιώσει τη ροή Poiseuille. Η περιοχή προσομοίωσης διπλασιάζεται στην κατεύθυνση y με έναν ομοιόμορφο εξαναγκασμό στην κατεύθυνση των θετικών x για $y \in [-1, 1]$ (το κάτω κανάλι, υποθέτοντας ότι το πλάτος του καναλιού είναι 2) και ομοιόμορφο εξαναγκασμό στην κατεύθυνση των αρνητικών x για $y \in [1, 3]$ (το άνω κανάλι). Περιοδικές συνοριακές συνθήκες εφαρμόζονται και στις δύο κατευθύνσεις x και y . Η λύση στο άνω ή κάτω κανάλι αναπαριστά τη ροή Poiseuille. Το Σχήμα3.2 δίνει ένα παράδειγμα της συγκεκριμένης διαμόρφωσης. Στο σχήμα, οι διακεκομμένες

γραμμές δηλώνουν τις θέσεις των τοιχωμάτων. Το πλήθος των γραμμών σε κάθε κανάλι είναι 4, αλλά μπορεί επίσης να είναι και ένας περιττός αριθμός. Η εφαρμογή αυτή αποφεύγει τη χρήση της συνοριακής συνθήκης αναπήδησης και εξάγει καλύτερα αποτελέσματα. Είναι ενδιαφέρον να μελετήσουμε την εφαρμογή αυτή στην εξίσωση LBGK (3.10). Προσομοιώσεις αναφέρουν ότι το προφίλ ταχύτητας σε μόνιμες συνθήκες είναι παραβολικό.



Σχήμα 3.2 Τετραγωνικός κυματικός εξαναγκασμός (square wave forcing) στην επίπεδη ροή σε κανάλι. Οι διακεκομμένες γραμμές υποδηλώνουν τις θέσεις των τοιχωμάτων. Τα δύο μεγάλα βέλη αριστερά δείχνουν τις κατευθύνσεις του ομοιόμορφου εξαναγκασμού (forcing).

Πρώτα, ας εξετάσουμε αν η αναλυτική λύση που δίνεται από τις Εξ.(3.26) αποτελεί μια λύση του προβλήματος. Θεωρούμε το κάτω κανάλι πλάτους 2 με τις συντεταγμένες όπως εικονίζονται στο Σχ.3.2, έτσι ώστε η αρχή να είναι τοποθετημένη στο κέντρο του καναλιού. Είναι φανερό από την εξαγωγή των Εξ.(3.26) ότι εάν τα \mathbf{x} , $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i$ βρίσκονται εντός του καναλιού, τότε η αναλυτική λύση (3.26) ικανοποιεί την Εξ.(3.10) με $\rho = \text{σταθερό}$ και $\mathbf{u} = (u_0(1 - y^2), 0)$. Το πραγματικό πρόβλημα λαμβάνει χώρα όταν η Εξ.(3.10) περιλαμβάνει κόμβους και στα δύο κανάλια. Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε την περίπτωση όπου $i = 2$, \mathbf{x} είναι ένας

κόμβος στη γραμμή 4 με τεταγμένη $y_4 = 1 - \frac{1}{2} dy$ και κόμβους στη γραμμή 5 με τεταγμένες $y_4 = 1 + \frac{1}{2} dy$ όπως δείχνει το Σχ.2. Σε αυτή την περίπτωση, η Εξ.(3.10) γράφεται:

$$f_2(y_5) = f_2(y_4) - \frac{1}{\tau} (f_2(y_4) - f_2^{(0)}(y_4)) + \frac{\delta G}{4} \quad (3.28)$$

Επειδή το άνω κανάλι έχει αντίθετο παραβολικό προφίλ ταχύτητας, ισχύει $f_2(y_5) = f_5(y_4)$. Έτσι:

$$f_5(y_4) = f_2(y_4) - \frac{1}{\tau} (f_2(y_4) - f_2^{(0)}(y_4)) + \frac{\delta G}{4} \quad (3.29)$$

Αντικαθιστώντας τα $f_2(y_4)$, $f_2^{(0)}(y_4)$, $f_5(y_4)$ των Εξ. (3.12) και (3.26) στην Εξ.(3.29), παίρνουμε:

$$\frac{1}{16} \rho u_0 \delta^2 (4\tau^2 - 6\tau + 1) = 0 \quad (3.30)$$

Για το λόγο αυτό η λύση των Εξ.(3.26) δεν ικανοποιεί την Εξ.(3.10) εκτός και $(4\tau^2 - 6\tau + 1) = 0$, οπότε παίρνουμε 2 ρίζες $\tau_+ = (3 + \sqrt{5})/4 \approx 1.3090$, $\tau_- = (3 - \sqrt{5})/4 \approx 0.3820$.

Θα προσπαθήσουμε τώρα να βρούμε μια ακριβή λύση της Εξ.(3.10) για τη διαμόρφωση του Σχ.2. Θεωρούμε το κάτω κανάλι με το G να δίνεται από την Εξ.(3.7). Γνωρίζουμε ότι το προφίλ ταχύτητας είναι λιγάκι διαφορετικό από το ακριβές προφίλ της ροής Poiseuille. Ωστόσο, ακόμη θεωρούμε τις 6 ιδιότητες που προαναφέρθηκαν πριν τις Εξ.(3.16), με την $u_x(y) = u_0(1 - y^2)$ να αντικαθίσταται με:

$$u_x(y) = \bar{u}_0(1 + k - y^2) \quad [\text{για κάποιες σταθερές } \bar{u}_0, k] \quad (3.31)$$

έτσι ώστε το προφίλ ταχύτητας να είναι συμμετρικό ως προς την κεντρική γραμμή του καναλιού. Όταν η Εξ.(3.10) περιλαμβάνει κόμβους και στα δύο κανάλια, χρησιμοποιούμε μια εξίσωση όπως η Εξ.(3.29). Η κατανομή ισορροπίας και εδώ δίνεται από τις Εξ.(3.17). Είναι εύκολο να παρατηρήσουμε ότι τα f_0 , f_1 , f_4 δίνονται από τις Εξ.(3.18) με $u = u_x(y)$ από την Εξ.(3.31). Έπειτα, θεωρώντας $f_i(y) = a_i + b_i y + c_i y^2$, $i = 2, 3, 5, 6$ και κάνοντας χρήση των ιδιοτήτων II - I6 και της Εξ.(3.10) εντός του κάτω καναλιού, βρίσκουμε:

$$\bar{u}_0 = u_0 \quad [\text{το } \bar{u}_0 \text{ σχετίζεται με το } G \text{ από την Εξ.(3.7)}]$$

και:

$$\begin{aligned} a_2 = a_6 &= \frac{1}{6} \rho u_0 (1 + k) + d - \tau \frac{\delta G}{4} \\ a_3 = a_5 &= -\frac{1}{6} \rho u_0 (1 + k) + d + \tau \frac{\delta G}{4} \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$b_2 = -b_6 = -b_3 = b_5 = \frac{1}{3} \tau \rho u_0 dy$$

$$c_2 = c_6 = -c_3 = -c_5 = -\frac{1}{6} \rho u_0$$

Μόνο το k δεν έχει ακόμη οριστεί. Εφαρμόζοντας στην Εξ.(3.10) $i = 2$ διαμέσου του τοιχώματος ανάμεσα στο άνω και κάτω κανάλια, παίρνουμε:

$$f_3(y_-) = f_2(y_-) - \frac{1}{\tau} (f_2(y_-) - f_2^{(0)}(y_-)) + \frac{\delta G}{4} \quad (3.33)$$

όπου $y_- = 1 - \frac{1}{2} dy$ η τεταγμένη της γραμμής ακριβώς κάτω από το τοίχωμα.

Λύνοντας την εξίσωση, παίρνουμε:

$$k = \frac{3}{16} (4\tau^2 - 6\tau + 1) \delta^2 \quad (3.34)$$

Είναι εύκολο να ελέγξουμε ότι η Εξ.(3.10) ικανοποιείται και για άλλες τιμές του i διαμέσου του τοιχώματος. Έτσι, η ακριβής λύση της Εξ.(3.10) στο κάτω κανάλι δίνεται από τις ακόλουθες σχέσεις:

$$\begin{aligned} f_0 &= d_0 - \rho u^2 \\ f_1 &= d + \frac{1}{3} \rho u + \frac{1}{2} \rho u^2 + \tau \frac{\delta G}{4} \\ f_4 &= d - \frac{1}{3} \rho u + \frac{1}{2} \rho u^2 - \tau \frac{\delta G}{4} \\ f_2 &= -\frac{1}{6} \rho u_0 y^2 + \frac{1}{3} \tau \rho u_0 y dy + \frac{1}{6} \rho u_0 (1 + k) + d - \tau \frac{\delta G}{4} \\ f_3 &= +\frac{1}{6} \rho u_0 y^2 - \frac{1}{3} \tau \rho u_0 y dy - \frac{1}{6} \rho u_0 (1 + k) + d + \tau \frac{\delta G}{4} \\ f_5 &= +\frac{1}{6} \rho u_0 y^2 + \frac{1}{3} \tau \rho u_0 y dy - \frac{1}{6} \rho u_0 (1 + k) + d + \tau \frac{\delta G}{4} \\ f_6 &= -\frac{1}{6} \rho u_0 y^2 - \frac{1}{3} \tau \rho u_0 y dy + \frac{1}{6} \rho u_0 (1 + k) + d - \tau \frac{\delta G}{4} \end{aligned} \quad (3.35)$$

με $u = u_x(y) = u_0(1 + k - y^2)$ και το k δίνεται από την Εξ.(3.34). Η λύση στο άνω κανάλι μπορεί να προκύψει από την αντισυμμετρία ως προς το τοίχωμα. Στο άνω ή κάτω κανάλι, η λύση σε μόνιμες συνθήκες των Εξ.(3.10) δίνει μια διακριτοποιημένη αναπαράσταση ενός ακριβούς παραβολικού προφίλ x - ταχυτήτων με τη μέγιστη ταχύτητα ίση με $u_0(1 + k)$. Το σχετικό σφάλμα στη μέγιστη ταχύτητα είναι $(1 + k)$, δηλαδή τάξεως $O(\delta^2)$. Το παραβολικό προφίλ διαθέτει μια ποσότητα $u_0 k$ στο τοίχωμα ($y = -1$ ή $y = 1$). Η μη - μηδενική ποσότητα της ταχύτητας πάνω στο τοίχωμα είναι επίσης τάξεως $O(\delta^2)$, υποδηλώνοντας δεύτερης τάξεως ακρίβειας. Όταν το $\tau = \tau_+ = (3 + \sqrt{5})/4 \approx 1.3090$, τότε $k = 0$ και η προσομοίωση δίνει ακριβώς τη ροή Poiseuille σύμφωνα με το G. Για $\tau = \tau_- = (3 - \sqrt{5})/4 \approx 0.3820$, πάλι παίρνουμε $k = 0$ αλλά η προσομοίωση είναι ασταθής για τη συγκεκριμένη τιμή του τ . Αναφέρουμε επίσης ότι για ένα δεδομένο μέγεθος πλέγματος (δεδομένο δ), εάν $\tau \rightarrow \infty$, τότε και το σφάλμα τείνει στο άπειρο. Τα συμπεράσματα αυτά επιβεβαιώθηκαν από αριθμητικές προσομοιώσεις.

3.3 Αναλυτική λύση της ροής Poiseuille σε τετραγωνικό πλέγμα (Square Lattice LBGK model)

Η διαδικασία που ακολουθούμε για την εύρεση των αναλυτικών εκφράσεων της ροής Poiseuille στο τετραγωνικό πλέγμα είναι ίδια με την προηγούμενη. Υπενθυμίζουμε ότι το μοντέλο αυτό χρησιμοποιεί τρεις τύπους σωματιδίων. Τα σωματίδια τύπου 1 κινούνται κατά μήκος των x και y αξόνων με ταχύτητα $\mathbf{e}_i = (\cos[\pi(i-1)/2], \sin[\pi(i-1)/2])$, $i = 1, 2, 3, 4$, και τα σωματίδια τύπου 2 κινούνται κατά μήκος των διαγώνιων κατευθύνσεων με ταχύτητα $\mathbf{e}_i = \sqrt{2} (\cos[\pi(i-4 - \frac{1}{2})/2], \sin[\pi(i-4 - \frac{1}{2})/2])$, $i = 5, 6, 7, 8$. Επίσης, υπάρχουν και τα σωματίδια τύπου 0 που βρίσκονται σε ηρεμία στον κάθε κόμβο, με $\mathbf{e}_0 = 0$. Κάθε κόμβος συνδέεται με τους 8 πλησιέστερους γειτονικούς με 8 δεσμούς μήκους δ ή $(\sqrt{2})\delta$. Η συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων $f_i(\mathbf{x}, t)$ ικανοποιεί το μοντέλο LBGK, Εξ.(3.1) (με $i = 0, \dots, 8$). Η πυκνότητα ρ και η μακροσκοπική ταχύτητα \mathbf{u} ορίζονται από τις Εξ.(3.2). Η κατανομή ισορροπίας μπορεί να επιλεγεί στην ακόλουθη μορφή για τα σωματίδια κάθε τύπου:

$$\begin{aligned}
f_0^{(0)} &= \frac{4}{9} \rho \left[1 - \frac{3}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right] \\
f_i^{(0)} &= \frac{1}{9} \rho \left[1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right], i = 1, 2, 3, 4 \\
f_i^{(0)} &= \frac{1}{36} \rho \left[1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \right], i = 5, 6, 7, 8
\end{aligned} \tag{3.36}$$

με:

$$\sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}^{(0)} = \rho, \quad \sum_{\sigma} \sum_i f_{\sigma i}^{(0)} \mathbf{e}_{\sigma i} = \rho \mathbf{u}$$

Οι μακροσκοπικές εξισώσεις δίνονται από τις σχέσεις (4) και (5) με $c_s^2 = 1/3$, και $v = [(2\tau - 1)/6]\delta$. Οι ιδιότητες $I1 \rightarrow I6$ ισχύουν, με τη μόνη διαφορά ότι η $I3$ αντικαθίσταται με $(f_2(y) = f_4(-y), f_5(y) = f_8(-y) \text{ και } f_6(y) = f_7(-y))$ [I3*] από τη συμμετρία της ροής και η σχέση (3.10) ισχύει για $i = 0, 1, \dots, 8$.

Για να ενσωματώσουμε τη σωματική δύναμη στο μοντέλο της ροής Poiseuille, επιλέγουμε τους συντελεστές h_i ως:

$$h_i = 0, i = 0, 2, 4 \quad h_1 = \frac{1}{3} G \quad h_3 = -\frac{1}{3} G \quad h_5 = h_8 = \frac{1}{12} G \quad h_6 = h_7 = -\frac{1}{12} G \tag{3.37}$$

ώστε να ικανοποιείται το σύστημα των εξισώσεων:

$$\sum_i h_i = 0 \Rightarrow h_0 + h_1 + h_2 + h_3 + h_4 + h_5 + h_6 + h_7 + h_8 = 0 \tag{3.38}$$

$$\sum_i h_i \mathbf{e}_i = \rho \mathbf{g} \Rightarrow \left\{ \begin{aligned} \sum_i h_i \mathbf{e}_{ix} = G &\Rightarrow h_1 - h_3 + h_5 - h_6 - h_7 + h_8 = G \\ \sum_i h_i \mathbf{e}_{iy} = 0 &\Rightarrow h_2 - h_4 + h_5 + h_6 - h_7 - h_8 = 0 \end{aligned} \right\} \tag{3.39}$$

$$\sum_i h_i \mathbf{e}_{ia} \mathbf{e}_{ib} = 0 \Rightarrow h_1 + h_2 + h_3 + h_4 + 4h_5 + 4h_7 = 0 \tag{3.40}$$

$$h_i = 0, i = 0, 2, 4 \tag{3.41}$$

Από τις Εξ. (3.36) παίρνουμε αναλυτικά:

$$f_0^{(0)} = \frac{4}{9} \rho \left(1 - \frac{3}{2} u^2 \right), \quad \{u = u_0(1 - y^2)\}$$

$$f_1^{(0)} = \frac{1}{9} \rho \left(1 + 3u + 3u^2 \right)$$

$$f_2^{(0)} = \frac{1}{9} \rho \left(1 - \frac{3}{2} u^2 \right)$$

$$f_3^{(0)} = \frac{1}{9} \rho \left(1 - 3u + 3u^2 \right)$$

$$f_4^{(0)} = \frac{1}{9}\rho\left(1 - \frac{3}{2}u^2\right) \quad (3.42)$$

$$f_5^{(0)} = \frac{1}{36}\rho\left(1 + 3u + 3u^2\right)$$

$$f_6^{(0)} = \frac{1}{36}\rho\left(1 - 3u + 3u^2\right)$$

$$f_7^{(0)} = \frac{1}{36}\rho\left(1 - 3u + 3u^2\right)$$

$$f_8^{(0)} = \frac{1}{36}\rho\left(1 + 3u + 3u^2\right)$$

Από τις ιδιότητες I1, I2 και την Εξ. (3.10), για $i = 0$ έχουμε:

$$f_0(y) = f_0(y) - \frac{1}{\tau}[f_0(y) - f_0^{(0)}(y)] \Rightarrow f_0(y) = f_0^{(0)}(y) = \frac{4}{9}\rho\left(1 - \frac{3}{2}u^2\right) \quad (3.43a)$$

Όμοια, για $i = 1$ και $i = 3$ παίρνουμε αντίστοιχα:

$$f_1(y) = f_1(y) - \frac{1}{\tau}[f_1(y) - f_1^{(0)}(y)] + \delta h_1 \Rightarrow f_1(y) = f_1^{(0)}(y) + \delta \tau h_1 \Rightarrow$$

$$f_1(y) = f_1^{(0)}(y) + \frac{1}{3}\delta \tau G \Rightarrow f_1(y) = f_1^{(0)}(y) + \frac{1}{3}\delta \tau \frac{2\rho \nu u_0}{3} \Rightarrow$$

$$f_1(y) = \frac{1}{9}\rho(1 + 3u + 3u^2) + \frac{2}{3}\tau \rho \nu u_0 \delta \quad (3.43b)$$

$$f_3(y) = f_3(y) - \frac{1}{\tau}[f_3(y) - f_3^{(0)}(y)] + \delta h_3 \Rightarrow f_3(y) = f_3^{(0)}(y) + \delta \tau h_3 \Rightarrow$$

$$f_3(y) = f_3^{(0)}(y) + \delta \tau \left(-\frac{1}{3}G\right) \Rightarrow f_3(y) = f_3^{(0)}(y) - \frac{2}{3}\delta \tau \rho \nu u_0 \Rightarrow$$

$$f_3(y) = \frac{1}{9}\rho(1 - 3u + 3u^2) - \frac{2}{3}\tau \rho \nu u_0 \delta \quad (3.43c)$$

Είναι φανερό πως τα f_0, f_1, f_3 είναι συναρτήσεις των y^2, y^4 επειδή εξαρτώνται από τα u, u^2 . Για να βρούμε τις υπόλοιπες εκφράσεις των $f_i(y)$, παρατηρούμε ότι οι $f_i^{(0)}$, $i = 2, 4, 5, 6, 7, 8$ έχουν όρους u, u^2 , οπότε είναι συναρτήσεις των y^2, y^4 , έτσι προτείνεται η ακόλουθη μορφή:

$$f_i(y) = a_i + b_i y + c_i y^2 + d_i y^3 + e_i y^4, \quad i = 2, 4, 5, 6, 7, 8 \quad (3.44)$$

όπου οι 30 άγνωστοι συντελεστές a_i, b_i, c_i, d_i, e_i εξαρτώνται από τα μεγέθη που περιγράφουν τη ροή εκτός του y .

Από την ιδιότητα I3, παίρνουμε:

$$f_2(y) = f_4(-y) \Rightarrow a_2 + b_2 y + c_2 y^2 + d_2 y^3 + e_2 y^4 = a_4 - b_4 y + c_4 y^2 - d_4 y^3 + e_4 y^4 \quad (3.45)$$

Επειδή η παραπάνω σχέση πρέπει να ισχύει για κάθε y , προκύπτει:

$$(a_2 = a_4, b_2 = -b_4, c_2 = c_4, d_2 = -d_4, e_2 = e_4) \quad (3.46a)$$

όμοια:

$$f_5(y) = f_8(-y) \Rightarrow a_5 + b_5 y + c_5 y^2 + d_5 y^3 + e_5 y^4 = a_8 - b_8 y + c_8 y^2 - d_8 y^3 + e_8 y^4$$

$$\Rightarrow (a_5 = a_8, b_5 = -b_8, c_5 = c_8, d_5 = -d_8, e_5 = e_8) \quad (3.46b)$$

$$f_6(y) = f_7(-y) \Rightarrow a_6 + b_6 y + c_6 y^2 + d_6 y^3 + e_6 y^4 = a_7 - b_7 y + c_7 y^2 - d_7 y^3 + e_7 y^4$$

$$\Rightarrow (a_6 = a_7, b_6 = -b_7, c_6 = c_7, d_6 = -d_7, e_6 = e_7) \quad (3.46c)$$

Από την ιδιότητα I6 βρίσκουμε:

$$f_2 - f_4 + f_5 + f_6 - f_7 - f_8 = 0 \Rightarrow (a_2 - a_4 + a_5 + a_6 - a_7 - a_8 = 0, b_2 - b_4 + b_5 + b_6 - b_7 - b_8 = 0, c_2 - c_4 + c_5 + c_6 - c_7 - c_8 = 0, d_2 - d_4 + d_5 + d_6 - d_7 - d_8 = 0, e_2 - e_4 + e_5 + e_6 - e_7 - e_8 = 0)$$

Χρησιμοποιώντας και τις εξισώσεις (3.46), παίρνουμε τελικά:

$$b_2 + b_5 + b_6 = 0 \quad (3.47a)$$

$$d_2 + d_5 + d_6 = 0 \quad (3.47b)$$

Από την ιδιότητα I4 έχουμε:

$$(f_0 + f_1 + f_3) + (f_2 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8) = \rho \Rightarrow f_2 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 = \frac{1}{3}\rho \Rightarrow (a_2 +$$

$$a_4 + a_5 + a_6 + a_7 + a_8 = \frac{1}{3}\rho, b_2 + b_4 + b_5 + b_6 + b_7 + b_8 = 0, c_2 + c_4 + c_5 + c_6 + c_7$$

$$+ c_8 = 0, d_2 + d_4 + d_5 + d_6 + d_7 + d_8 = 0, e_2 + e_4 + e_5 + e_6 + e_7 + e_8 = 0)$$

και από τις εξισώσεις (3.46) προκύπτει:

$$a_2 + a_5 + a_6 = \frac{1}{6}\rho \quad (3.48a)$$

$$c_2 + c_5 + c_6 = 0 \quad (3.48b)$$

$$e_2 + e_5 + e_6 = 0 \quad (3.48c)$$

Από την ιδιότητα I5 παίρνουμε:

$$f_1 - f_3 + f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = \rho u \Rightarrow f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = \rho u - f_1 + f_3 \Rightarrow f_5 - f_6 - f_7 + f_8 = \frac{1}{3}\rho u_0(1-4\tau\delta) - \frac{1}{3}\rho u_0 y^2 \Rightarrow (a_5 - a_6 - a_7 + a_8 = \frac{1}{3}\rho u_0(1-4\tau\delta), b_5 - b_6 - b_7 + b_8 = 0, c_5 - c_6 - c_7 + c_8 = -\frac{1}{3}\rho u_0, d_5 - d_6 - d_7 + d_8 = 0, e_5 - e_6 - e_7 + e_8 = 0)$$

Από τις εξισώσεις (3.46) και επειδή $v = \frac{(2\tau-1)}{6}\delta$, τελικά προκύπτει:

$$a_5 - a_6 = \frac{1}{6}\rho u_0 + \frac{1}{9}\tau\rho u_0\delta^2 - \frac{2}{9}\tau^2\rho u_0\delta^2 \quad (3.49a)$$

$$c_5 - c_6 = -\frac{1}{6}\rho u_0 \quad (3.49b)$$

$$e_5 = e_6 \quad (3.49c)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (3.1) με $i = 2$, έχουμε:

$$f_2(y + dy) = f_2(y) - \frac{1}{\tau}(f_2(y) - f_2^{(0)}(y)) \quad \{dy = \delta\} \quad (3.50)$$

Τοποθετώντας την έκφραση της $f_2^{(0)}$ και τη σχέση (3.45) στην παραπάνω εξίσωση, παίρνουμε:

$$a_2 + b_2(y + \delta) + c_2(y + \delta)^2 + d_2(y + \delta)^3 + e_2(y + \delta)^4 = \left(1 - \frac{1}{\tau}\right)(a_2 + b_2y + c_2y^2 + d_2y^3 + e_2y^4) + \frac{\rho}{9\tau}\left(1 - \frac{3}{2}u^2\right), u = u_0(1 - y^2) \quad (3.51)$$

Παραγοντοποιώντας την παραπάνω σχέση ως προς τους όρους y^0, y, y^2, y^3, y^4 παίρνουμε:

$$y^4 \rightarrow e_2 = -\frac{1}{6}\rho u_0^2 \quad (3.52a)$$

$$y^3 \rightarrow d_2 = \frac{2}{3}\tau\rho u_0^2\delta \quad (3.52b)$$

$$y^2 \rightarrow c_2 = \frac{1}{3}\rho u_0^2 + \tau\rho u_0^2\delta^2 - 2\tau^2\rho u_0^2\delta^2 \quad (3.52c)$$

$$y \rightarrow b_2 = 4\tau^3\rho u_0^2\delta^3 - 4\tau^2\rho u_0^2\delta^3 + \frac{2}{3}\tau\rho u_0^2\delta^3 - \frac{2}{3}\tau\rho u_0^2\delta \quad (3.52d)$$

$$y^0 \rightarrow a_2 = \frac{1}{9}\rho + \frac{1}{6}\rho u_0^2 + \frac{1}{6}\tau\rho u_0^2\delta^4 - \frac{7}{3}\tau^2\rho u_0^2\delta^4 - \frac{1}{3}\tau\rho u_0^2\delta^2 + 6\tau^3\rho u_0^2\delta^4 +$$

$$\frac{2}{3}\tau^2\rho u_o^2\delta^2 - 4\tau^4\rho u_o^2\delta^4 \quad (3.52e)$$

Εργαζόμενοι ομοίως και στην κατεύθυνση 5 ($i = 5$), έχουμε:

$$f_5(y + dy) = f_5(y) - \frac{1}{\tau}(f_5(y) - f_5^{(0)}(y)) + \frac{1}{12}G\delta \quad (3.53)$$

$$a_5 + b_5(y + \delta) + c_5(y + \delta)^2 + d_5(y + \delta)^3 + e_5(y + \delta)^4 = \left(1 - \frac{1}{\tau}\right)(a_5 + b_5y + c_5y^2 + d_5y^3 + e_5y^4) + \frac{1}{36\tau}\rho\left[1 + 3u_o(1 - y^2) + 3u_o^2(1 - y^2)^2\right] + \frac{1}{12}G\delta \quad (3.54)$$

$$y^4 \rightarrow e_5 = \frac{1}{12}\rho u_o^2 \quad (3.55a)$$

$$y^3 \rightarrow d_5 = -\frac{1}{3}\tau\rho u_o^2\delta \quad (3.55b)$$

$$y^2 \rightarrow c_5 = -\frac{1}{12}\rho u_o - \frac{1}{6}\rho u_o^2 - \frac{1}{2}\tau\rho u_o^2\delta^2 + \tau^2\rho u_o^2\delta^2 \quad (3.55c)$$

$$y \rightarrow b_5 = \frac{1}{6}\tau\rho u_o\delta + \frac{1}{3}\tau\rho u_o^2\delta - \frac{1}{3}\tau\rho u_o^2\delta^3 + 2\tau^2\rho u_o^2\delta^3 - 2\tau^3\rho u_o^2\delta^3 \quad (3.55d)$$

$$y^0 \rightarrow a_5 = \frac{1}{36}\rho + \frac{1}{12}\rho u_o + \frac{1}{18}\tau\rho u_o\delta^2 - \frac{1}{9}\tau^2\rho u_o\delta^2 + \frac{1}{12}\rho u_o^2 + \frac{1}{6}\tau\rho u_o^2\delta^2 - \frac{1}{12}\tau\rho u_o^2\delta^4 - \frac{1}{3}\tau^2\rho u_o^2\delta^2 + \frac{7}{6}\tau^2\rho u_o^2\delta^4 - 3\tau^3\rho u_o^2\delta^4 + 2\tau^4\rho u_o^2\delta^4 \quad (3.55e)$$

$$(13c) \Rightarrow e_6 = \frac{1}{12}\rho u_o^2 \quad (3.56)$$

$$(11b) \Rightarrow d_6 = -\frac{1}{3}\tau\rho u_o^2\delta \quad (3.57)$$

$$(13b) \Rightarrow c_6 = \frac{1}{12}\rho u_o - \frac{1}{6}\rho u_o^2 - \frac{1}{2}\tau\rho u_o^2\delta^2 + \tau^2\rho u_o^2\delta^2 \quad (3.58)$$

$$(11a) \Rightarrow b_6 = -\frac{1}{6}\tau\rho u_o\delta + \frac{1}{3}\tau\rho u_o^2\delta - \frac{1}{3}\tau\rho u_o^2\delta^3 + 2\tau^2\rho u_o^2\delta^3 - 2\tau^3\rho u_o^2\delta^3 \quad (3.59)$$

$$(13a) \Rightarrow a_6 = \frac{1}{36}\rho - \frac{1}{12}\rho u_o - \frac{1}{18}\tau\rho u_o\delta^2 + \frac{1}{9}\tau^2\rho u_o\delta^2 + \frac{1}{12}\rho u_o^2 + \frac{1}{6}\tau\rho u_o^2\delta^2 - \frac{1}{12}\tau\rho u_o^2\delta^4 - \frac{1}{3}\tau^2\rho u_o^2\delta^2 + \frac{7}{6}\tau^2\rho u_o^2\delta^4 - 3\tau^3\rho u_o^2\delta^4 + 2\tau^4\rho u_o^2\delta^4 \quad (3.60)$$

Έχοντας υπολογίσει τους άγνωστους συντελεστές a_i, b_i, c_i, d_i, e_i της Εξ.(3.45), μαζί με τις Εξ.(3.44), έχουμε τη λύση της Εξ.(3.10), η οποία περιγράφει ακριβώς τη ροή Poiseuille.

Συνοψίζοντας την αναλυτική λύση της ροής Poiseuille, έχουμε:

$$\begin{aligned}
 f_0(y) &= \frac{4}{9}\rho \left(1 - \frac{3}{2}u^2\right) \\
 f_1(y) &= \frac{1}{9}\rho(1 + 3u + 3u^2) + \frac{2}{3}\tau\rho u_0\delta \\
 f_3(y) &= \frac{1}{9}\rho(1 - 3u + 3u^2) - \frac{2}{3}\tau\rho u_0\delta \\
 f_i(y) &= a_i + b_i y + c_i y^2 + d_i y^3 + e_i y^4, \quad i = 2, 4, 5, 6, 7, 8 \\
 a_2 = a_4 &= \frac{1}{9}\rho + \frac{1}{6}\rho u_0^2 + \frac{1}{6}\tau\rho u_0^2\delta^4 - \frac{7}{3}\tau^2\rho u_0^2\delta^4 - \frac{1}{3}\tau\rho u_0^2\delta^2 + 6\tau^3\rho u_0^2\delta^4 + \\
 &\quad \frac{2}{3}\tau^2\rho u_0^2\delta^2 - 4\tau^4\rho u_0^2\delta^4 \\
 b_2 = -b_4 &= 4\tau^3\rho u_0^2\delta^3 - 4\tau^2\rho u_0^2\delta^3 + \frac{2}{3}\tau\rho u_0^2\delta^3 - \frac{2}{3}\tau\rho u_0^2\delta \\
 c_2 = c_4 &= \frac{1}{3}\rho u_0^2 + \tau\rho u_0^2\delta^2 - 2\tau^2\rho u_0^2\delta^2 \\
 d_2 = -d_4 &= \frac{2}{3}\tau\rho u_0^2\delta \\
 e_2 = e_4 &= -\frac{1}{6}\rho u_0^2 \\
 a_5 = a_8 &= \frac{1}{36}\rho + \frac{1}{12}\rho u_0 + \frac{1}{18}\tau\rho u_0\delta^2 - \frac{1}{9}\tau^2\rho u_0\delta^2 + \frac{1}{12}\rho u_0^2 + \frac{1}{6}\tau\rho u_0^2\delta^2 \\
 &\quad - \frac{1}{12}\tau\rho u_0^2\delta^4 - \frac{1}{3}\tau^2\rho u_0^2\delta^2 + \frac{7}{6}\tau^2\rho u_0^2\delta^4 - 3\tau^3\rho u_0^2\delta^4 + 2\tau^4\rho u_0^2\delta^4 \\
 b_5 = -b_8 &= \frac{1}{6}\tau\rho u_0\delta + \frac{1}{3}\tau\rho u_0^2\delta - \frac{1}{3}\tau\rho u_0^2\delta^3 + 2\tau^2\rho u_0^2\delta^3 - 2\tau^3\rho u_0^2\delta^3 \\
 c_5 = c_8 &= -\frac{1}{12}\rho u_0 - \frac{1}{6}\rho u_0^2 - \frac{1}{2}\tau\rho u_0^2\delta^2 + \tau^2\rho u_0^2\delta^2 \\
 d_5 = -d_8 &= -\frac{1}{3}\tau\rho u_0^2\delta
 \end{aligned} \tag{3.61}$$

$$e_5 = e_8 = \frac{1}{12} \rho u_o^2$$

$$a_6 = a_7 = \frac{1}{36} \rho - \frac{1}{12} \rho u_o - \frac{1}{18} \tau \rho u_o \delta^2 + \frac{1}{9} \tau^2 \rho u_o \delta^2 + \frac{1}{12} \rho u_o^2 + \frac{1}{6} \tau \rho u_o^2 \delta^2 \\ - \frac{1}{12} \tau \rho u_o^2 \delta^4 - \frac{1}{3} \tau^2 \rho u_o^2 \delta^2 + \frac{7}{6} \tau^2 \rho u_o^2 \delta^4 - 3 \tau^3 \rho u_o^2 \delta^4 + 2 \tau^4 \rho u_o^2 \delta^4$$

$$b_6 = -b_7 = -\frac{1}{6} \tau \rho u_o \delta + \frac{1}{3} \tau \rho u_o^2 \delta - \frac{1}{3} \tau \rho u_o^2 \delta^3 + 2 \tau^2 \rho u_o^2 \delta^3 - 2 \tau^3 \rho u_o^2 \delta^3$$

$$c_6 = c_7 = \frac{1}{12} \rho u_o - \frac{1}{6} \rho u_o^2 - \frac{1}{2} \tau \rho u_o^2 \delta^2 + \tau^2 \rho u_o^2 \delta^2$$

$$d_6 = -d_7 = -\frac{1}{3} \tau \rho u_o^2 \delta$$

$$e_6 = e_7 = \frac{1}{12} \rho u_o^2$$

Ας εξετάσουμε τώρα σε τι συνοριακή συνθήκη αντιστοιχεί η αναλυτική λύση. Θεωρώντας το κάτω σύνορο με $y = -1$, $u = 0$, βρίσκουμε τη σχέση των f_{6i} μετά τη σύγκρουση:

$$f_1 - f_3 = \frac{4}{3} \tau \rho u_o \delta, \quad f_2 - f_4 = -2 \delta^3 (4 \tau^3 \rho u_o^2 - 4 \tau^2 \rho u_o^2 + \frac{2}{3} \tau \rho u_o^2) \\ f_5 - f_7 = -\frac{2}{9} \tau^2 \rho u_o \delta^2 + \frac{1}{9} \tau \rho u_o^2 \delta^2 + 4 \tau^3 \rho u_o^2 \delta^3 - 4 \tau^2 \rho u_o^2 \delta^3 + \frac{2}{3} \tau \rho u_o^2 \delta^3 \quad (3.62) \\ f_6 - f_8 = +\frac{2}{9} \tau^2 \rho u_o \delta^2 - \frac{1}{9} \tau \rho u_o^2 \delta^2 + 4 \tau^3 \rho u_o^2 \delta^3 - 4 \tau^2 \rho u_o^2 \delta^3 + \frac{2}{3} \tau \rho u_o^2 \delta^3$$

Εάν εφαρμόσουμε τη συνθήκη αναπήδησης στο κάτω σύνορο όπου $f_1 = f_3$, $f_2 = f_4$, $f_5 = f_7$, $f_6 = f_8$, το σφάλμα που εισάγεται στα f_1 και f_3 είναι τάξεως δ . Αυτό δείχνει ότι η συνοριακή συνθήκη αναπήδησης είναι $1^{η}$ τάξεως ακρίβειας. Για να εξαχθεί μια αναλυτική λύση στην προσομοίωση LBGK, θα πρέπει να επιλεγεί μια κατάλληλη συνοριακή συνθήκη. Καμιά αριθμητική προσομοίωση με τετραγωνικό πλέγμα στο μοντέλο BGK δεν έχει εξάγει ακριβή λύση της ροής Poiseuille μέχρι τώρα. Βέβαια, χρησιμοποιώντας $\tau = 1$ και θέτοντας στην κατανομή ισορροπίας μηδενική ταχύτητα στο σύνορο, είναι σύμφωνο με την αναλυτική λύση και δίνει την ακριβή λύση (επιβεβαιωμένο και από προσομοιώσεις), αλλά $\tau = 1$ είναι πολύ περιοριστικό. Η λεπτομερής παρουσίαση της αναλυτικής λύσης στο σύνορο δεν παρέχει μια συνοριακή συνθήκη γενικής χρήσης. Εντούτοις, η αναλυτική λύση μας δίνει κάποια

καθοδήγηση για την ανάπτυξη καλύτερων συνοριακών συνθηκών γενικής χρήσης για το συγκεκριμένο μοντέλο.

3.4 Αναλυτική λύση της ροής Couette σε τριγωνικό πλέγμα

Θεωρούμε τη ροή μεταξύ δύο παράλληλων πλακών ($y = 0, y = 1$) που προκαλείται από τη συνεχή κίνηση της πάνω πλάκας με ταχύτητα $u = u_0$. Στην περίπτωση αυτή, η λύση δίνεται από τις σχέσεις:

$$u = u_x(y) = u_0 y, \quad 0 \leq y < 1, \quad u_y = 0, \quad \nabla p = 0 \quad (3.63)$$

Οι ιδιότητες $I1 \rightarrow I6$ της περίπτωσης (3.2) ισχύουν, εκτός της $I3$ και με τη διαφορά ότι στην $I5$ έχουμε $u = u_x(y) = u_0 y$. Η βασική μας σχέση είναι η (3.1).

Ξεκινώντας από τις σχέσεις (3.16), προκύπτουν οι (3.17). Από τις ιδιότητες $I1, I2$ και την Εξ. (3.1), για $i = 0$ παίρνουμε τη σχέση (3.18a), ενώ για $i = 1$ & $i = 4$ παίρνουμε:

$$f_1(y) = f_1(y) - \frac{1}{\tau} [f_1(y) - f_1^{(0)}(y)] \Rightarrow f_1(y) = f_1^{(0)}(y) = d + \frac{1}{3}\rho u + \frac{1}{2}\rho u^2 \quad (3.64a)$$

$$f_4(y) = f_4(y) - \frac{1}{\tau} [f_4(y) - f_4^{(0)}(y)] \Rightarrow f_4(y) = f_4^{(0)}(y) = d - \frac{1}{3}\rho u + \frac{1}{2}\rho u^2 \quad (3.64b)$$

Οι υπόλοιπες σχέσεις των $f_i(y)$ είναι συναρτήσεις του y (εφόσον οι $f_i^{(0)}$, $i = 2, 3, 5, 6$ δεν περιέχουν όρους u^2), οπότε θεωρούμε την ακόλουθη μορφή εξίσωσης:

$$f_i(y) = a_i + b_i y, \quad i = 2, 3, 5, 6 \quad (3.65)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (3.1) για $i = 2, 5, 6$ παίρνουμε:

$$f_2(y + dy) = f_2(y) - \frac{1}{\tau} (f_2(y) - f_2^{(0)}(y)) \Rightarrow a_2 + b_2(y + dy) = a_2 + b_2 y - \frac{1}{\tau} (a_2 + b_2 y - d - \frac{1}{6}\rho u) \quad (3.66a)$$

$$b_2 y - d - \frac{1}{6}\rho u \Rightarrow (b_2 = \frac{1}{6}\rho u_0, a_2 = d - \frac{1}{6}\tau \rho u_0 dy)$$

$$f_5(y - dy) = f_5(y) - \frac{1}{\tau} (f_5(y) - f_5^{(0)}(y)) \Rightarrow a_5 + b_5(y - dy) = a_5 + b_5 y - \frac{1}{\tau} (a_5 + b_5 y - d + \frac{1}{6}\rho u) \quad (3.66b)$$

$$b_5 y - d + \frac{1}{6}\rho u \Rightarrow (b_5 = -\frac{1}{6}\rho u_0, a_5 = d - \frac{1}{6}\tau \rho u_0 dy)$$

$$f_6(y - dy) = f_6(y) - \frac{1}{\tau}(f_6(y) - f_6^{(0)}(y)) \Rightarrow a_6 + b_6(y - dy) = a_6 + b_6y - \frac{1}{\tau}(a_6 + b_6y - d - \frac{1}{6}\rho u) \Rightarrow (b_6 = \frac{1}{6}\rho u_0, a_6 = d + \frac{1}{6}\tau\rho u_0 dy) \quad (3.66c)$$

και από την I6:

$$b_3 = -b_2 \quad (3.67)$$

Από την I4, προκύπτει:

$$a_3 = 2d - a_2 = d + \frac{1}{6}\tau\rho u_0 dy \quad (3.68)$$

Συνοψίζοντας τα αποτελέσματα, έχουμε:

$$\begin{aligned} f_0 &= d_0 - \rho u^2, \{u = u_0 y\} \\ f_1(y) &= d + \frac{1}{3}\rho u + \frac{1}{2}\rho u^2 \\ f_2(y) &= \frac{1}{6}\rho u_0 y + d - \frac{1}{6}\tau\rho u_0 dy \\ f_3(y) &= -\frac{1}{6}\rho u_0 y + d + \frac{1}{6}\tau\rho u_0 dy \\ f_4(y) &= d - \frac{1}{3}\rho u + \frac{1}{2}\rho u^2 \\ f_5(y) &= -\frac{1}{6}\rho u_0 y + d - \frac{1}{6}\tau\rho u_0 dy \\ f_6(y) &= \frac{1}{6}\rho u_0 y + d + \frac{1}{6}\tau\rho u_0 dy \end{aligned} \quad (3.69)$$

Σημειώνουμε ότι οι αναλυτικές αυτές εκφράσεις ισχύουν για κάθε u_0, τ, dy .

3.5 Αναλυτική λύση της ροής Couette σε τετραγωνικό πλέγμα

Όμοια, και σε αυτή την περίπτωση οι ιδιότητες I1→I6 ισχύουν πέραν της I3, και στην I5 έχουμε $u = u_0 y \{y \in [0, 1]\}$. Η βασική σχέση είναι η (3.1) με $i = 0, 1, \dots, 8$. Από τις εξισώσεις (3.36) προκύπτουν οι σχέσεις (3.42). Από τις ιδιότητες I1, I2 και την Εξ. (3.1) παίρνουμε:

$$i = 0 \rightarrow f_0(y) = f_0(y) - \frac{1}{\tau}[f_0(y) - f_0^{(0)}(y)] \Rightarrow f_0(y) = f_0^{(0)}(y) = \frac{4}{9}\rho \left(1 - \frac{3}{2}u^2\right) \quad (3.70a)$$

$$i=1 \rightarrow f_1(y) = f_1(y) - \frac{1}{\tau} [f_1(y) - f_1^{(0)}(y)] \Rightarrow f_1(y) = f_1^{(0)}(y) = \frac{1}{9}\rho(1 + 3u + 3u^2) \quad (3.70b)$$

$$i=3 \rightarrow f_3(y) = f_3(y) - \frac{1}{\tau} [f_3(y) - f_3^{(0)}(y)] \Rightarrow f_3(y) = f_3^{(0)}(y) = \frac{1}{9}\rho(1 - 3u + 3u^2) \quad (3.70c)$$

Για τις υπόλοιπες εκφράσεις f_i θεωρούμε την ακόλουθη μορφή:

$$f_i(y) = a_i + b_i y + c_i y^2, \quad i = 2, 4, 5, 6, 7, 8$$

Αντικαθιστώντας στην Εξ.(3.1) την παραπάνω εξίσωση ($i=2$) και την $f_2^{(0)}$ έχουμε:

$$a_2 + b_2(y + \delta) + c_2(y + \delta)^2 = a_2 + b_2 y + c_2 y^2 - \frac{1}{\tau} [a_2 + b_2 y + c_2 y^2 - \frac{1}{9}\rho(1 - \frac{3}{2}u_0^2 y^2)] \quad (3.71)$$

Παραγοντοποιώντας ως προς y^0 , y , y^2 παίρνουμε:

$$y^2 \rightarrow c_2 = -\frac{1}{6}\rho u_0^2$$

$$y \rightarrow b_2 = \frac{1}{3}\tau \rho \delta u_0^2 \quad (3.72)$$

$$y^0 \rightarrow a_2 = \frac{1}{9}\rho + \frac{1}{6}\tau \rho \delta^2 u_0^2 - \frac{1}{3}\tau^2 \rho \delta^2 u_0^2$$

Όμοια εργαζόμαστε και για $i = 4$:

$$a_4 + b_4(y + \delta) + c_4(y + \delta)^2 = a_4 + b_4 y + c_4 y^2 - \frac{1}{\tau} [a_4 + b_4 y + c_4 y^2 - \frac{1}{9}\rho(1 - \frac{3}{2}u_0^2 y^2)] \quad (3.73)$$

$$y^2 \rightarrow c_4 = -\frac{1}{6}\rho u_0^2$$

$$y \rightarrow b_4 = \frac{1}{3}\tau \rho \delta u_0^2 \quad (3.74)$$

$$y^0 \rightarrow a_4 = \frac{1}{9}\rho + \frac{1}{6}\tau \rho \delta^2 u_0^2 - \frac{1}{3}\tau^2 \rho \delta^2 u_0^2$$

$i = 5$:

$$a_5 + b_5(y + \delta) + c_5(y + \delta)^2 = a_5 + b_5 y + c_5 y^2 - \frac{1}{\tau} [a_5 + b_5 y + c_5 y^2 - \frac{1}{36}\rho(1 + 3u_0 y + 3u_0^2 y^2)] \quad (3.75)$$

$$y^2 \rightarrow c_5 = \frac{1}{12}\rho u_0^2$$

$$y \rightarrow b_5 = \frac{1}{12} \rho u_0 - \frac{1}{6} \tau \rho \delta u_0^2 \quad (3.76)$$

$$y^0 \rightarrow a_5 = \frac{1}{36} \rho - \frac{1}{12} \tau \rho u_0 \delta - \frac{1}{12} \tau \rho \delta^2 u_0^2 + \frac{1}{6} \tau^2 \rho \delta^2 u_0^2$$

i = 6:

$$a_6 + b_6(y + \delta) + c_6(y + \delta)^2 = a_6 + b_6 y + c_6 y^2 - \frac{1}{\tau} [a_6 + b_6 y + c_6 y^2 - \frac{1}{36} \rho(1 - 3u_0 y + 3u_0^2 y^2)] \quad (3.77)$$

$$y^2 \rightarrow c_6 = \frac{1}{12} \rho u_0^2$$

$$y \rightarrow b_6 = -\frac{1}{12} \rho u_0 - \frac{1}{6} \tau \rho \delta u_0^2 \quad (3.78)$$

$$y^0 \rightarrow a_6 = \frac{1}{36} \rho + \frac{1}{12} \tau \rho u_0 \delta - \frac{1}{12} \tau \rho \delta^2 u_0^2 + \frac{1}{6} \tau^2 \rho \delta^2 u_0^2$$

i = 7:

$$a_7 + b_7(y - \delta) + c_7(y - \delta)^2 = a_7 + b_7 y + c_7 y^2 - \frac{1}{\tau} [a_7 + b_7 y + c_7 y^2 - \frac{1}{36} \rho(1 - 3u_0 y + 3u_0^2 y^2)] \quad (3.79)$$

$$y^2 \rightarrow c_7 = \frac{1}{12} \rho u_0^2$$

$$y \rightarrow b_7 = -\frac{1}{12} \rho u_0 + \frac{1}{6} \tau \rho \delta u_0^2 \quad (3.80)$$

$$y^0 \rightarrow a_7 = \frac{1}{36} \rho - \frac{1}{12} \tau \rho u_0 \delta - \frac{1}{12} \tau \rho \delta^2 u_0^2 + \frac{1}{6} \tau^2 \rho \delta^2 u_0^2$$

i = 8:

$$a_8 + b_8(y - \delta) + c_8(y - \delta)^2 = a_8 + b_8 y + c_8 y^2 - \frac{1}{\tau} [a_8 + b_8 y + c_8 y^2 - \frac{1}{36} \rho(1 + 3u_0 y + 3u_0^2 y^2)] \quad (3.81)$$

$$y^2 \rightarrow c_8 = \frac{1}{12} \rho u_0^2$$

$$y \rightarrow b_8 = \frac{1}{12} \rho u_0 + \frac{1}{6} \tau \rho \delta u_0^2 \quad (3.82)$$

$$y^0 \rightarrow a_8 = \frac{1}{36}\rho + \frac{1}{12}\tau\mu_0\delta - \frac{1}{12}\tau\rho\delta^2 u_0^2 + \frac{1}{6}\tau^2\rho\delta^2 u_0^2$$

Συνοψίζοντας τα παραπάνω αποτελέσματα, η αναλυτική λύση που παίρνουμε είναι η ακόλουθη:

$$f_0(y) = \frac{4}{9}\rho\left(1 - \frac{3}{2}u_0^2 y^2\right)$$

$$f_1(y) = \frac{1}{9}\rho(1 + 3u_0 y + 3u_0^2 y^2)$$

$$f_3(y) = \frac{1}{9}\rho(1 - 3u_0 y + 3u_0^2 y^2)$$

$$f_2(y) = -\frac{1}{3}\tau^2\rho u_0^2\delta^2 + \frac{1}{6}\tau\rho u_0^2\delta^2 + \frac{1}{9}\rho + \frac{1}{3}\tau\rho u_0^2\delta y - \frac{1}{6}\rho u_0^2 y^2$$

$$f_4(y) = -\frac{1}{3}\tau^2\rho u_0^2\delta^2 + \frac{1}{6}\tau\rho u_0^2\delta^2 + \frac{1}{9}\rho - \frac{1}{3}\tau\rho u_0^2\delta y - \frac{1}{6}\rho u_0^2 y^2 \quad (3.83)$$

$$f_5(y) = \frac{1}{6}\tau^2\rho u_0^2\delta^2 - \frac{1}{12}\tau\rho u_0^2\delta^2 + \frac{1}{36}\rho - \frac{1}{12}\tau\rho u_0\delta + \left(-\frac{1}{6}\tau\rho u_0^2\delta + \frac{1}{12}\rho u_0\right)y + \frac{1}{12}\rho u_0^2 y^2$$

$$f_6(y) = \frac{1}{6}\tau^2\rho u_0^2\delta^2 - \frac{1}{12}\tau\rho u_0^2\delta^2 + \frac{1}{36}\rho + \frac{1}{12}\tau\rho u_0\delta + \left(-\frac{1}{6}\tau\rho u_0^2\delta - \frac{1}{12}\rho u_0\right)y + \frac{1}{12}\rho u_0^2 y^2$$

$$f_7(y) = \frac{1}{6}\tau^2\rho u_0^2\delta^2 - \frac{1}{12}\tau\rho u_0^2\delta^2 + \frac{1}{36}\rho - \frac{1}{12}\tau\rho u_0\delta + \left(\frac{1}{6}\tau\rho u_0^2\delta - \frac{1}{12}\rho u_0\right)y + \frac{1}{12}\rho u_0^2 y^2$$

$$f_8(y) = \frac{1}{6}\tau^2\rho u_0^2\delta^2 - \frac{1}{12}\tau\rho u_0^2\delta^2 + \frac{1}{36}\rho + \frac{1}{12}\tau\rho u_0\delta + \left(\frac{1}{6}\tau\rho u_0^2\delta + \frac{1}{12}\rho u_0\right)y + \frac{1}{12}\rho u_0^2 y^2$$

Στη ροή Couette, το άνω σύνορο είναι κινούμενο. Η αναλυτική λύση που δίνεται εδώ μας παρέχει μια καθοδήγηση για τη δημιουργία μιας κατάλληλης συνοριακής συνθήκης για κινούμενα όρια.

Πρέπει να τονίσουμε πως οι παραπάνω αναλυτικές λύσεις ισχύουν για κάθε u_0 , τ και δ . Οι λύσεις αυτές θα μας βοηθήσουν στην καλύτερη κατανόηση της μεθόδου και θα μας καθοδηγήσουν σε εφαρμογές.

Κεφάλαιο 4.

Αριθμητικές λύσεις των ροών Poiseuille & Couette

4.1 Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο είδαμε τις αναλυτικές λύσεις των ροών Poiseuille και Couette στο τριγωνικό (εξαγωνικό) και τετραγωνικό πλέγμα, με τη χρήση των εξισώσεων κατανομής των σωματιδίων f_i , όπου και προέκυψαν συμπεράσματα για την τάξη ακρίβειας των συνοριακών συνθηκών (εφαρμόζοντας τη συνθήκη bounce – back στο σύνορο) αλλά και για τη συμπεριφορά της μεθόδου. Στο παρόν κεφάλαιο μελετάμε τις αριθμητικές λύσεις των παραπάνω ροών στα δύο πλέγματα, και εξάγουμε συμπεράσματα για το εύρος τιμών των διαφόρων παραμέτρων και πως αυτές επηρεάζουν την ταχύτητα σύγκλισης του αλγόριθμου. Επίσης, γίνεται σύγκριση μεταξύ των δύο πλεγμάτων. Στο τέλος του κεφαλαίου περιγράφεται αναλυτικά η υλοποίηση των συνοριακών συνθηκών με χρήση της συνθήκης bounce – back.

Επιγραμματικά, ο γενικός αλγόριθμος επίλυσης περιγράφεται στα παρακάτω βήματα:

1. Επιλέγονται το πλέγμα, το μοντέλο ταχυτήτων και αρχικά υποθετικά πεδία ταχυτήτων και πυκνοτήτων. Συνήθως, το αρχικό πεδίο ταχυτήτων έχει μηδενικές ταχύτητες και σε κάθε κόμβο τίθεται αρχική πυκνότητα ίση με αυτήν του ρευστού.
2. Υπολογίζεται η συνάρτηση κατανομής ισορροπίας f_i^{eq} από την εξίσωση:

$$f_i^{eq} = \rho [A + B \xi_i \cdot \mathbf{u} + C (\xi_i \cdot \mathbf{u})^2 + D u^2] \quad (4.1)$$

όπου ρ η πυκνότητα του ρευστού, ξ_i η ταχύτητα των σωματιδίων, \mathbf{u} η μακροσκοπική ταχύτητα του ρευστού, και A, B, C, D σταθερές.

3. Λύνεται η εξίσωση:

$$f_i(\mathbf{r} + \xi_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\tau} [f_i^{eq}(\mathbf{r}, t) - f_i(\mathbf{r}, t)] \quad (4.2)$$

με αρχική συνθήκη $f_i(\mathbf{r}, 0) = f_i^{eq}(\mathbf{r}, 0)$ και υπολογίζεται η f_i στο κοντινότερο σημείο του \mathbf{r} , δηλαδή στο $\mathbf{r} + \xi_i \Delta t$ για ταχύτητα σωματιδίου ξ_i .

4. Οι νέες τιμές της πυκνότητας και της ταχύτητας προκύπτουν από τις σχέσεις:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_i f_i(\mathbf{r}, t) \quad (4.3)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \sum_i \xi_i f_i(\mathbf{r}, t) \quad (4.4)$$

5. Ακολουθούν οι συνοριακές συνθήκες του προβλήματος.

6. Επιστροφή στο βήμα 2.

Η επαναληπτική διαδικασία ολοκληρώνεται όταν (για προβλήματα μόνιμης κατάστασης) τυπικά κριτήρια σύγκλισης ικανοποιούνται. Υπενθυμίζουμε πως η μέθοδος είναι 2^{as} τάξεως ακρίβειας και οι συνοριακές συνθήκες που συνήθως χρησιμοποιούνται είναι 1^{ns} τάξεως ακρίβειας.

4.2 Αριθμητικές λύσεις

4.2.1 Τετραγωνικό πλέγμα

4.2.1.1 Ροή Poiseuille

Θεωρούμε ένα κανάλι πλάτους L , με την αρχή των αξόνων του καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων τοποθετημένη στην κάτω πλευρά ($y \in [0, L]$). Η επίπεδη ροή Poiseuille $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$ περιγράφεται αναλυτικά με τις σχέσεις:

$$u_x = \frac{GL}{2\nu\rho} y \left(1 - \frac{y}{L}\right), \quad u_y = 0, \quad \frac{\partial p}{\partial x} = -G, \quad \frac{\partial p}{\partial y} = 0 \quad (4.5)$$

όπου G είναι μια σταθερά που σχετίζεται με τη χαρακτηριστική ταχύτητα u_0 ($= u_{max}$) σύμφωνα με τη σχέση:

$$G = 8 \rho \nu u_0 / L^2 \quad (4.6)$$

και η πυκνότητα της ροής ρ είναι σταθερή. Οι παραπάνω σχέσεις αποτελούν την ακριβή λύση των εξισώσεων Navier – Stokes για ασυμπίεστη ροή.

Στην προσομοίωση της ροής χρησιμοποιούμε το τετραγωνικό πλέγμα (βλ. Σχ. 2.1) για το οποίο ισχύουν οι σχέσεις:

$$f_i^{eq} = \rho w_i (1 + 3 \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} u^2) \quad (2.23)$$

με $w_0 = 4/9$, $w_1 = w_3 = w_5 = w_7 = 1/9$ και $w_2 = w_4 = w_6 = w_8 = 1/36$

όπου f_i^{eq} η συνάρτηση κατανομής ισορροπίας. Το κινηματικό ιξώδες συνδέεται με τον χρόνο χαλάρωσης τ , σύμφωνα με τη σχέση:

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \delta \quad (4.7)$$

όπου το ν μετρείται σε φυσικές μονάδες ($\mu = \rho \nu$). Η LBGK, η οποία ενσωματώνει τη σωματική δύναμη, είναι μια τροποποίηση της Εξ.(3.1) και δίνεται από τη σχέση:

$$f_i(\mathbf{x} + \delta \mathbf{e}_i, t + \delta) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)] + \delta h_i \quad i = 0, 1, \dots, 8 \quad (4.8)$$

όπου οι συντελεστές h_i επιλέγονται ως:

$$h_i = 0, i = 0, 2, 4 \quad h_1 = \frac{1}{3} G \quad h_3 = -\frac{1}{3} G \quad h_5 = h_8 = \frac{1}{12} G \quad h_6 = h_7 = -\frac{1}{12} G \quad (3.37)$$

Για απλότητα, θεωρούμε το πλάτος του καναλιού $L = 1$ και χρησιμοποιούμε αρχικά 11 κόμβους. Οι δοκιμές έγιναν χρησιμοποιώντας δεδομένα από διάφορα ρευστά προκειμένου να μελετήσουμε τη συμπεριφορά της μεθόδου και του συγκεκριμένου πλέγματος. Στον αλγόριθμο εισάγουμε την πυκνότητα και το κινηματικό ιξώδες του ρευστού, την κλίση της πίεσης και τον αριθμό των επαναλήψεων. Ο αλγόριθμος τερματίζεται όταν συγκλίνει στο 99.7% της αναλυτικής λύσης. Στα αποτελέσματα που ακολουθούν, τα ρευστά που χρησιμοποιούνται είναι τα ακόλουθα:

Ρευστό	Re	ν	ρ	τ	Ucent
a	10	10^{-3}	1000	0.53	0.015
b	100	10^{-4}	500	0.503	0.015
c	1000	10^{-5}	100	0.5003	0.015
d	1500	10^{-6}	10	0.50003	$2.25 \cdot 10^{-3}$
e	2000	10^{-2}	900	0.8	30

Τα ρευστά αυτά παρουσιάζουν σημαντικές διαφορές στην πυκνότητα και το κινηματικό ιξώδες. Η αναγραφόμενη τιμή του τ προκύπτει από το κινηματικό ιξώδες

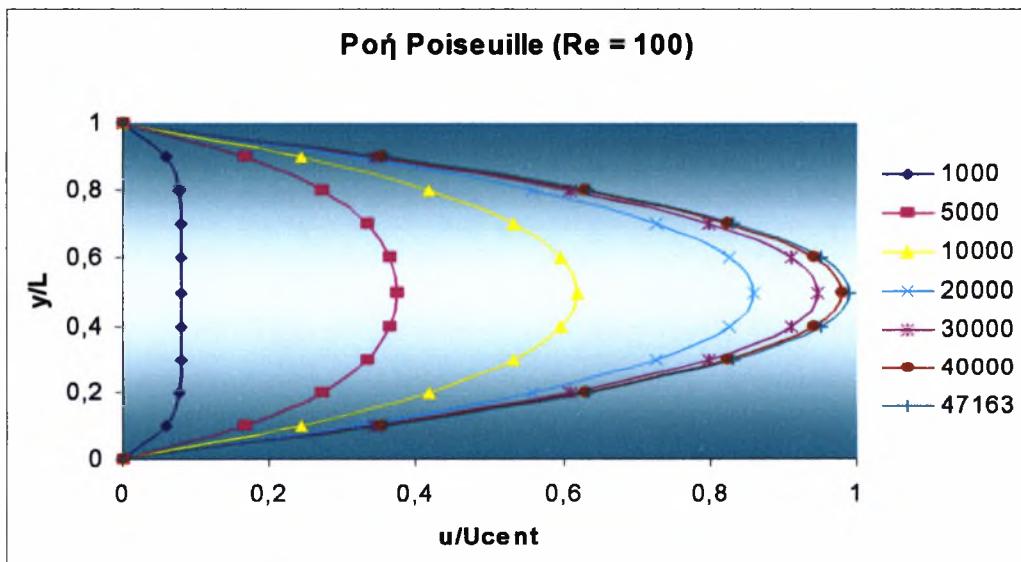
σύμφωνα με τη Σχέση (4.7). Τα μεγέθη ν , ρ , U_{cent} μπορούν να μετρούνται σε φυσικές μονάδες και σημειώνουμε πως είναι τάξη μεγέθους των πραγματικών ρευστών.

Σημειώνουμε πως ο αριθμός Re που χρησιμοποιούμε ορίζεται ως $Re = \frac{\bar{u}L}{\nu}$ όπου \bar{u} η μέση ταχύτητα ροής του ρευστού μέσα στον αγωγό, L το πλάτος του καναλιού και ν το κινηματικό ιξώδες του ρευστού ($= \mu / \rho$). Η μέση ταχύτητα του ρευστού υπολογίζεται ως εξής:

$$\bar{u} = \frac{1}{L} \int_0^L u(y) dy = \frac{1}{L} \int_0^L \frac{GL}{2\nu\rho} y \left(1 - \frac{y}{L}\right) dy = \frac{GL^2}{12\nu\rho}$$

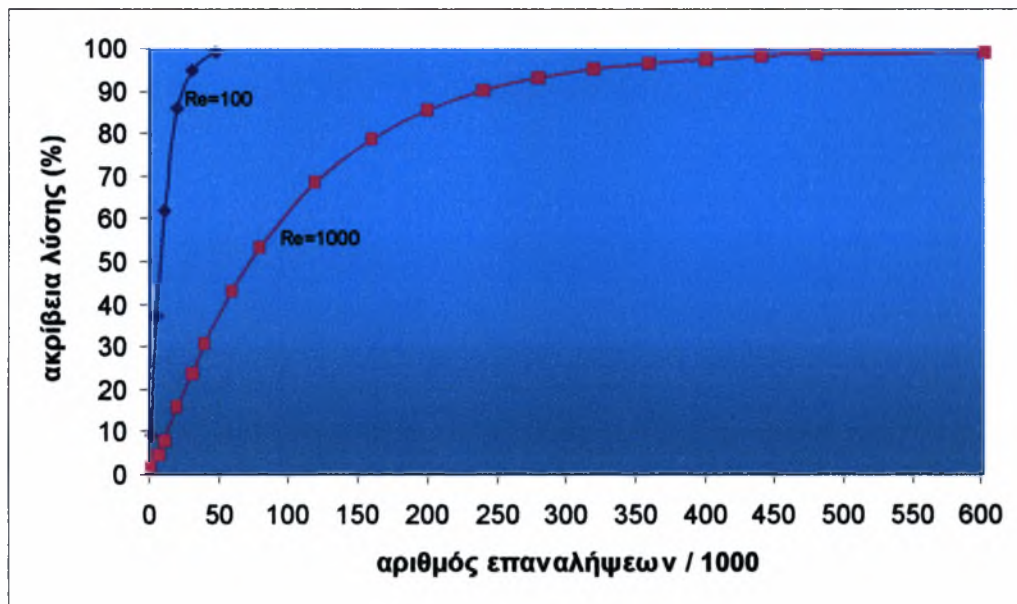
Στη βιβλιογραφία, ο αριθμός Re ορίζεται μερικές φορές με βάση τη μέγιστη ταχύτητα u_o στον άξονα ροής του καναλιού.

Η πρώτη δοκιμή έγινε χρησιμοποιώντας τα δεδομένα για $Re = 100$. Στο ακόλουθο σχήμα εικονίζονται οι κατανομές των ταχυτήτων για διαφορετικό αριθμό επαναλήψεων (μεταβατικές) μέχρι την τελική λύση. Από την εφαρμογή αυτή συμπεραίνουμε πως οι συνοριακές συνθήκες μη – ολίσθησης σε σταθερό τοίχωμα που εκφράζονται με τις συναρτήσεις κατανομής των σωματιδίων f_i (bounce – back boundary conditions) είναι σωστές. Η ακριβής υλοποίησή τους περιγράφεται αναλυτικά στο τέλος του κεφαλαίου αυτού.



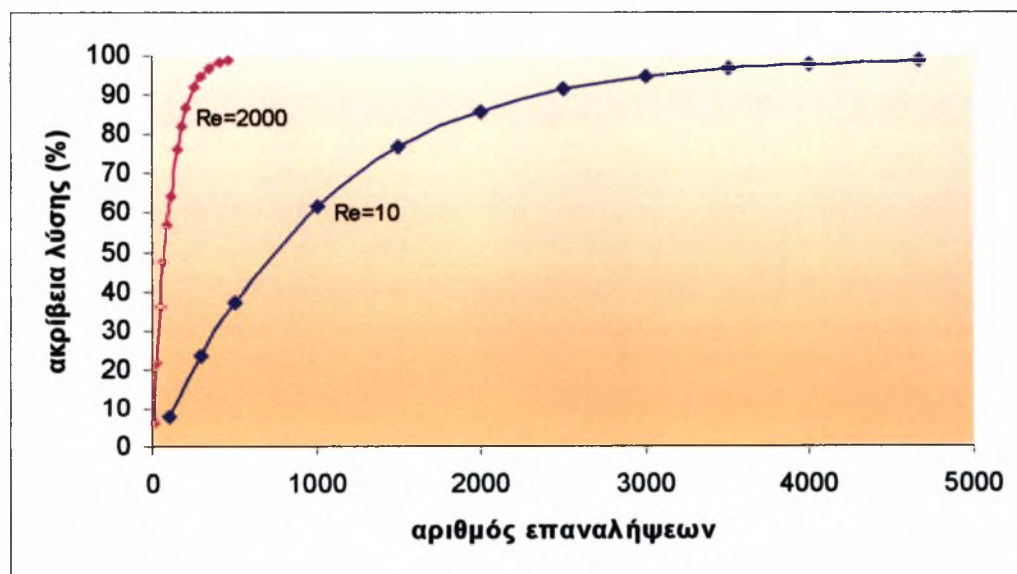
Σχήμα 4.1 Κατανομές ταχυτήτων για διαφορετικό αριθμό επαναλήψεων (μεταβατικές).

Ακολούθησαν δοκιμές και με τα υπόλοιπα ρευστά, λαμβάνοντας κάθε φορά σωστά αποτελέσματα. Στα ακόλουθα σχήματα απεικονίζεται η ακρίβεια της λύσης

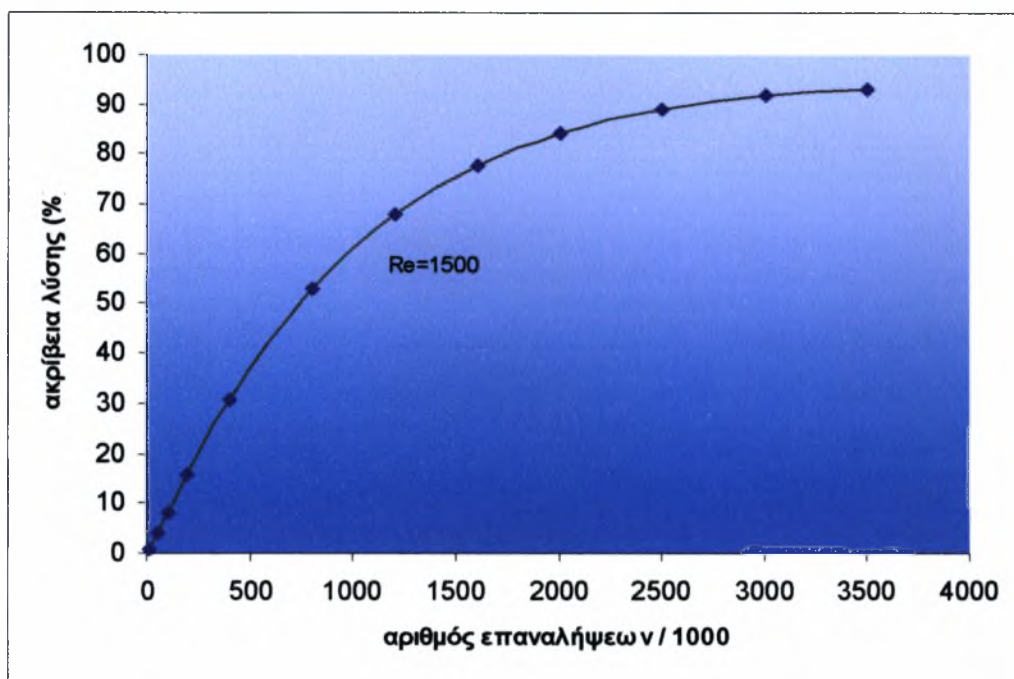


Σχήμα 4.2 Ακρίβεια λύσης συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων για τα ρευστά (b , $Re = 100$) και (c , $Re = 1000$), στη ροή Poiseuille.

συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων (μέχρι την τελική λύση) για κάθε ρευστό και μπορούμε να συμπεράνουμε την ταχύτητα σύγκλισης του αλγόριθμου.



Σχήμα 4.3 Ακρίβεια λύσης συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων για τα ρευστά (a , $Re = 10$) και (e , $Re = 2000$), στη ροή Poiseuille.

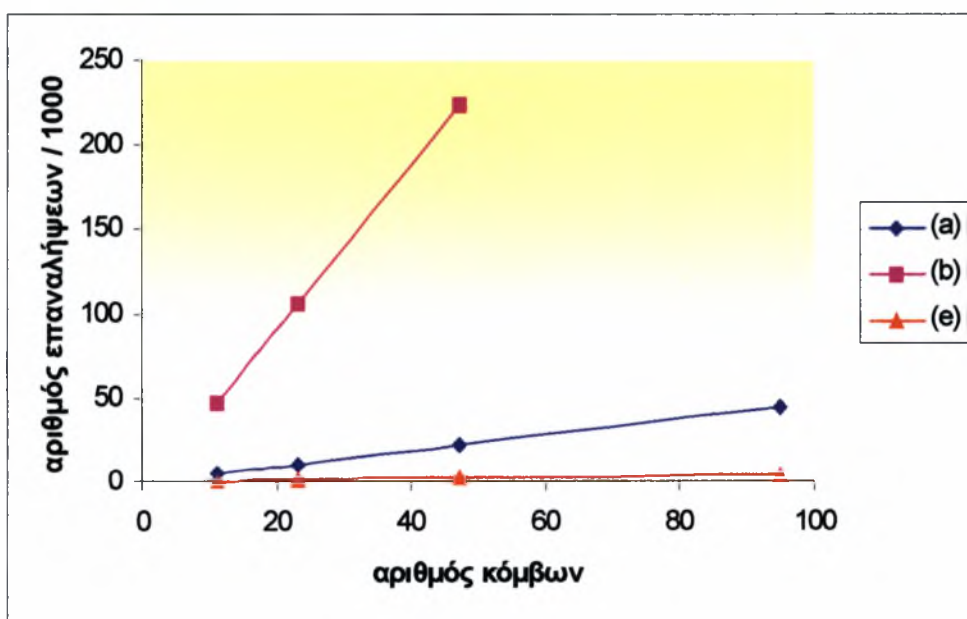


Σχήμα 4.4 Ακρίβεια λύσης συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων για το ρευστό (d , $Re = 1500$), στη ροή Poiseuille.

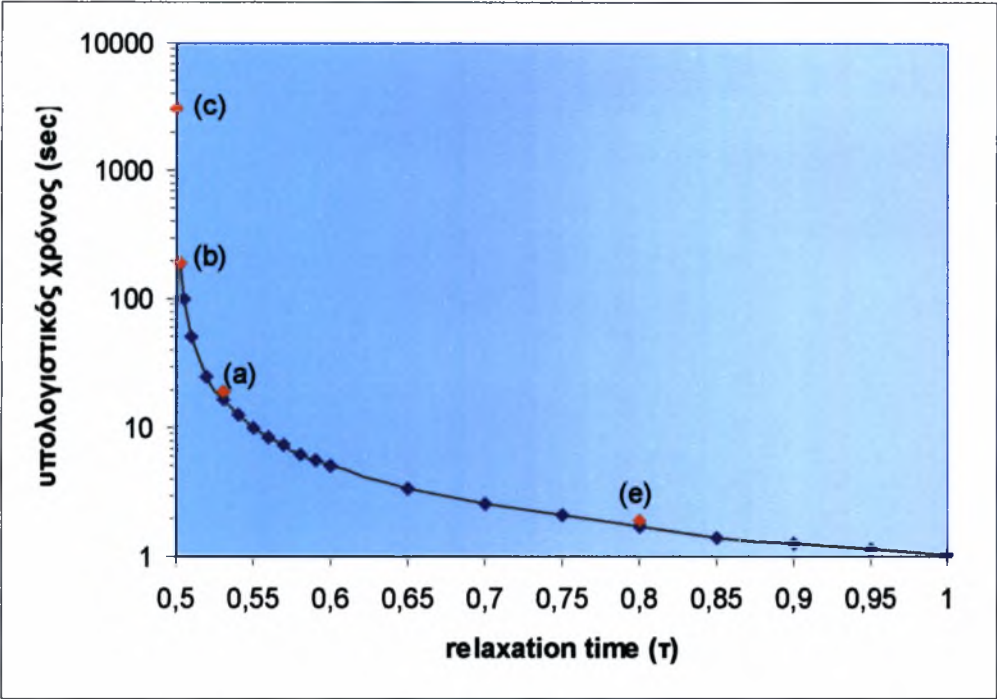
Από τα παραπάνω διαγράμματα προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα: Η ταχύτητα σύγκλισης και το πλήθος των επαναλήψεων εξαρτώνται από τις φυσικές ιδιότητες των ρευστών και κυρίως από το κινηματικό ιξώδες, το οποίο ρυθμίζει τον χρόνο χαλάρωσης. Στην περίπτωση του ρευστού (e), το οποίο έχει και το μεγαλύτερο κινηματικό ιξώδες (άρα και τ), ο αλγόριθμος τερματίζει στα 469 βήματα, ενώ στην περίπτωση του ρευστού (d) που έχει το μικρότερο κινηματικό ιξώδες, ο αλγόριθμος τερματίστηκε στα 3500000 βήματα φτάνοντας στο 93.17% της αναλυτικής λύσης, επειδή ο ρυθμός σύγκλισης πάνω από αυτή την ακρίβεια ήταν εξαιρετικά μικρός. Τα υπόλοιπα ρευστά βρίσκονται μεταξύ των δύο αυτών περιπτώσεων. Επομένως, όσο μεγαλύτερο είναι το κινηματικό ιξώδες του ρευστού, τόσο πιο γρήγορα συγκλίνει ο αλγόριθμος, άρα και ο υπολογιστικός χρόνος που απαιτείται μικραίνει. Η πυκνότητα φαίνεται πως δεν έχει μεγάλη επίδραση στη μέθοδο.

Ο χρόνος χαλάρωσης τ , δεν μπορεί να πάρει τιμές μικρότερες του 0.5, διαφορετικά το κινηματικό ιξώδες γίνεται αρνητικό και ο αλγόριθμος δεν λειτουργεί. Το εύρος τιμών του τ θα λέγαμε πως είναι (0.5, 1]. Όσο πιο κοντά βρίσκεται στο 0.5, τόσο περισσότερο αυξάνει το πλήθος των επαναλήψεων (και ελαττώνεται η ταχύτητα σύγκλισης) και μάλιστα ραγδαία. Το κινηματικό ιξώδες των περισσότερων ρευστών

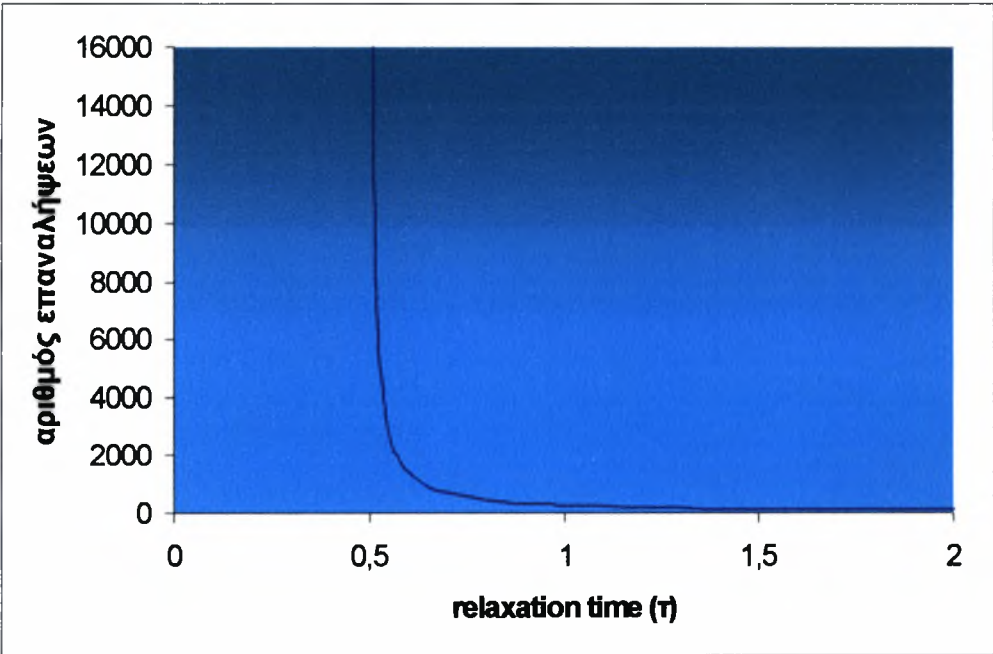
δίνει στο τ τιμές κοντά στο 0.5. Το τ μπορεί να αυξηθεί ελαττώνοντας το πλεγματοκό διαστήμα δ (δηλαδή πυκνώνοντας το πλέγμα), αλλά αυτό δεν εγγυάται μείωση του υπολογιστικού χρόνου διότι μεγαλώνει σημαντικά το πλήθος των δεδομένων και των πράξεων που εκτελεί ο υπολογιστής, όπως επίσης και τον αριθμό των επαναλήψεων. Στο Σχ. 4.5 εικονίζεται ο αριθμός των επαναλήψεων συναρτήσει του πλήθους των κόμβων, για τρία διαφορετικά ρευστά. Παρατηρούμε πως υπάρχει γραμμική σχέση του αριθμού των επαναληπτικών βημάτων με το πλήθος των κόμβων. Η κλίση της ευθείας εξαρτάται από τις φυσικές ιδιότητες του ρευστού και κυρίως από το κινηματικό ιξώδες. Όσο μικρότερο είναι το κινηματικό ιξώδες, τόσο μεγαλύτερη είναι η κλίση της ευθείας. Τα ρευστά (c) και (d) δίνουν ευθείες με πολύ πιο απότομη κλίση. Στο Σχ. 4.6 απεικονίζεται ο απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος (μέχρι τελικής σύγκλισης) συναρτήσει του χρόνου χαλάρωσης τ . Τα σημεία με κόκκινο χρώμα αντιστοιχούν στα προαναφερθέντα ρευστά. Το διάγραμμα αυτό είναι τυπικό και προέκυψε από εφαρμογές που έγιναν σε H/Y με επεξεργαστή PII, 233MHz. Στο Σχ. 4.7 εικονίζεται η ταχύτητα σύγκλισης του αλγόριθμου συναρτήσει του τ για δεδομένο μέγεθος πλέγματος (τυπικό διάγραμμα).



Σχήμα 4.5 Αριθμός επαναλήψεων συναρτήσει του πλήθους των κόμβων για τρία διαφορετικά ρευστά (a, b, e) στη ροή Poiseuille.



Σχήμα 4.6 Απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος στη ροή Poiseuille συναρτήσει του χρόνου χαλάρωσης τ , σε επεξεργαστή PII (233 MHz). Συμπεριλαμβάνονται τα ρευστά (a, b, c, e).



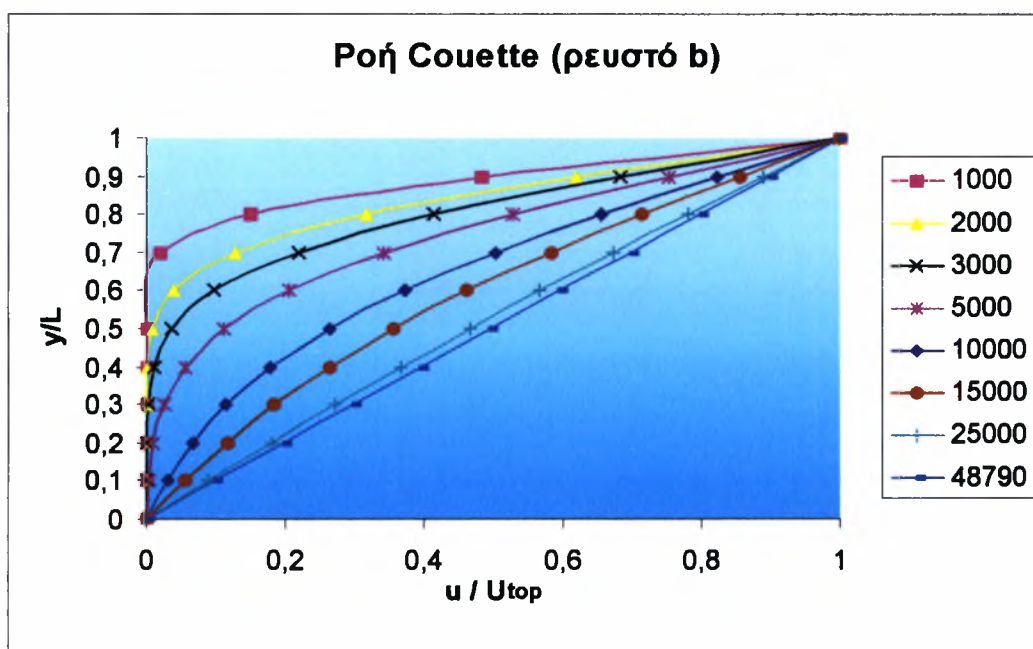
Σχήμα 4.7 Ταχύτητα σύγκλισης σε σχέση με την παράμετρο τ .

4.2.1.2 Ροή Couette

Θεωρούμε τη ροή μεταξύ δύο παράλληλων πλακών ($y = 0, y = 1$) που προκαλείται από τη συνεχή κίνηση της πάνω πλάκας με ταχύτητα $u = u_0$. Στην περίπτωση αυτή, η λύση δίνεται από τις σχέσεις:

$$u = u_x(y) = u_0 y, \quad 0 \leq y < 1, \quad u_y = 0, \quad \nabla p = 0 \quad (4.9)$$

Οι σχέσεις που ισχύουν είναι οι (2.23) και η (4.4) χωρίς τον όρο δh . Και σε αυτή την περίπτωση χρησιμοποιούνται τα ρευστά που αναφέραμε πιο πάνω. Στο Σχ. 4.8 εικονίζεται η ροή Couette, με τις μεταβατικές κατανομές ταχυτήτων για διαφορετικούς αριθμούς επαναλήψεων. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν είναι του ρευστού (b). Σημειώνουμε πως και εδώ χρησιμοποιούμε 11 κόμβους αρχικά, ενώ η ταχύτητα της άνω πλάκας είναι $u_0 = 1$.

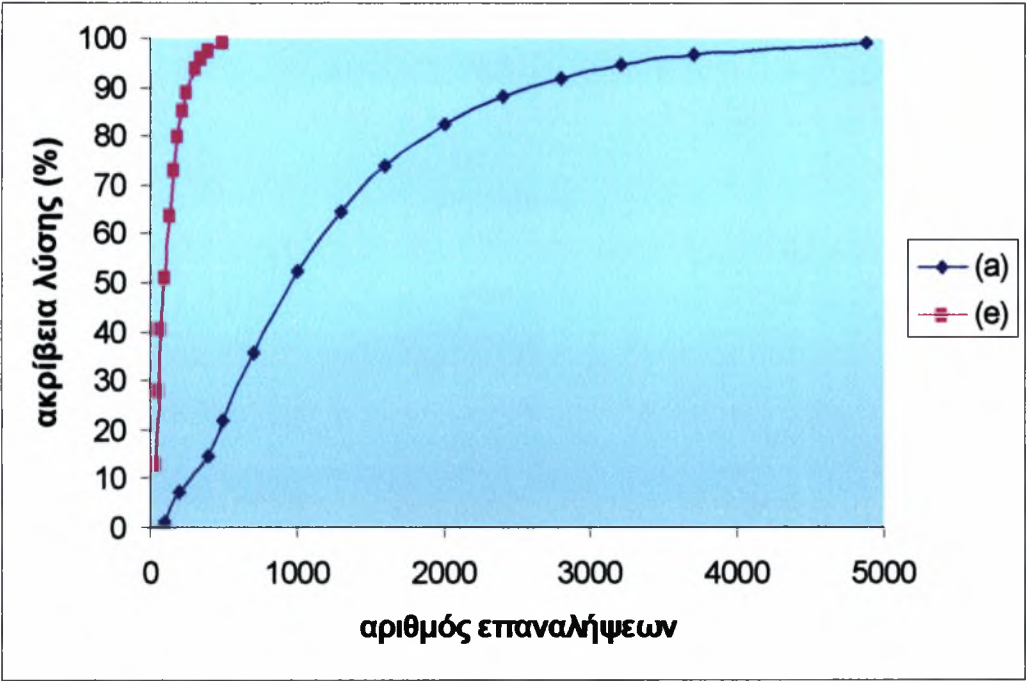


Σχήμα 4.8 Κατανομές ταχυτήτων για διαφορετικό αριθμό επαναλήψεων (μεταβατικές).

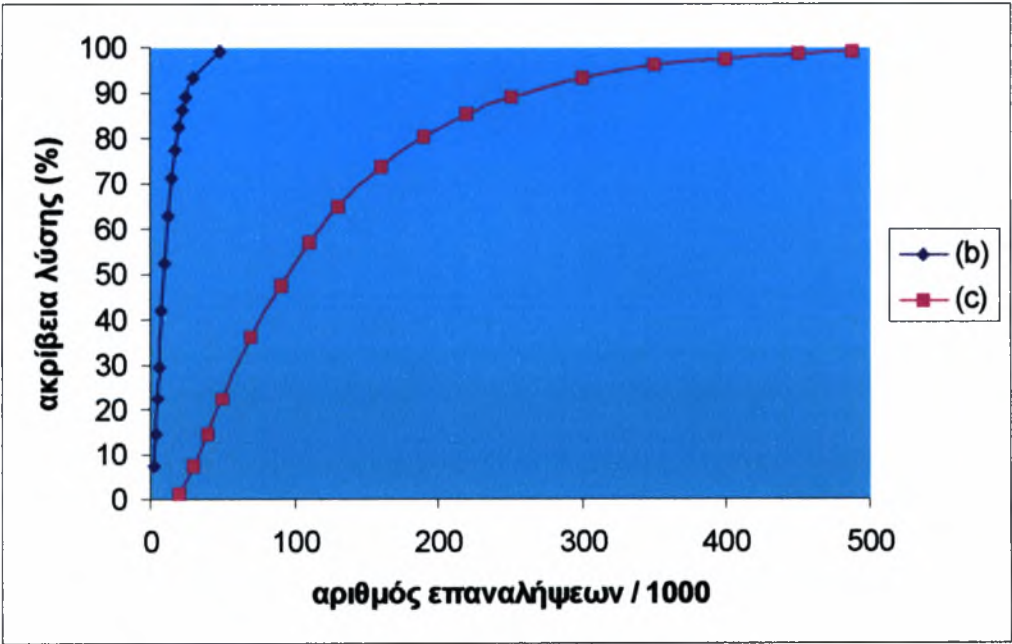
Στα επόμενα σχήματα απεικονίζεται η ταχύτητα σύγκλισης για κάθε ρευστό. Παρατηρούμε πως και σε αυτό το πρόβλημα το μοντέλο BGK παρουσιάζει την ίδια συμπεριφορά με τη ροή Poiseuille. Ο αριθμός των επαναλήψεων μέχρι το 99.7% της αναλυτικής λύσης είναι σχεδόν ο ίδιος με της ροής Poiseuille για κάθε ρευστό.

Από τις παραπάνω εφαρμογές συμπεραίνουμε πως οι συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν σε ακίνητο και κινούμενο τοίχωμα, εκφρασμένες με τις f_i ,

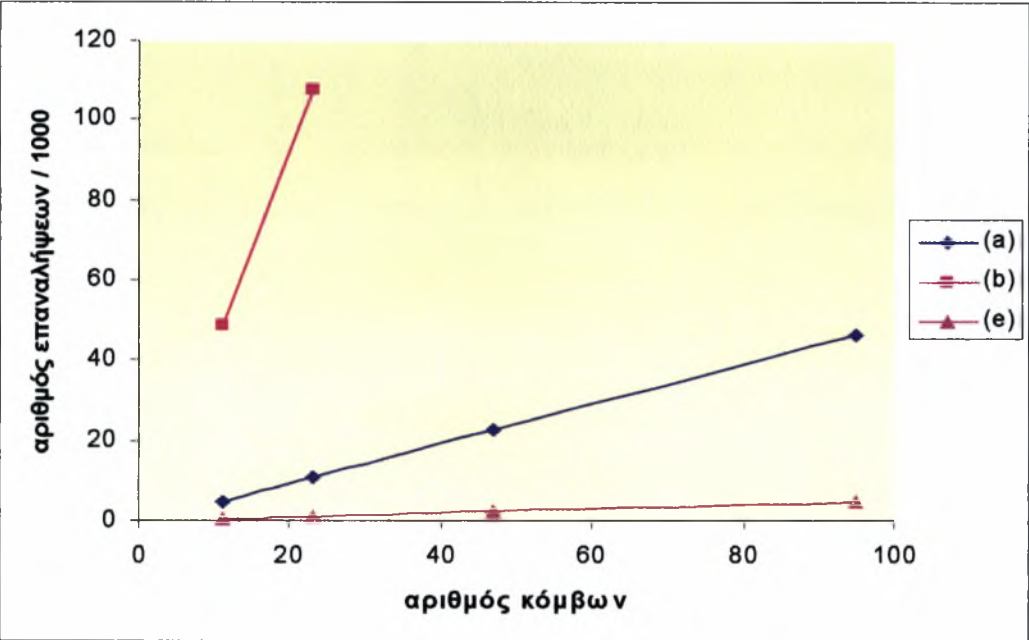
είναι σωστές. Παρακάτω στο κεφάλαιο αναλύεται η υλοποίησή τους. Τα όσα αναφέραμε στη ροή Poiseuille, ισχύουν και στη ροή Couette.



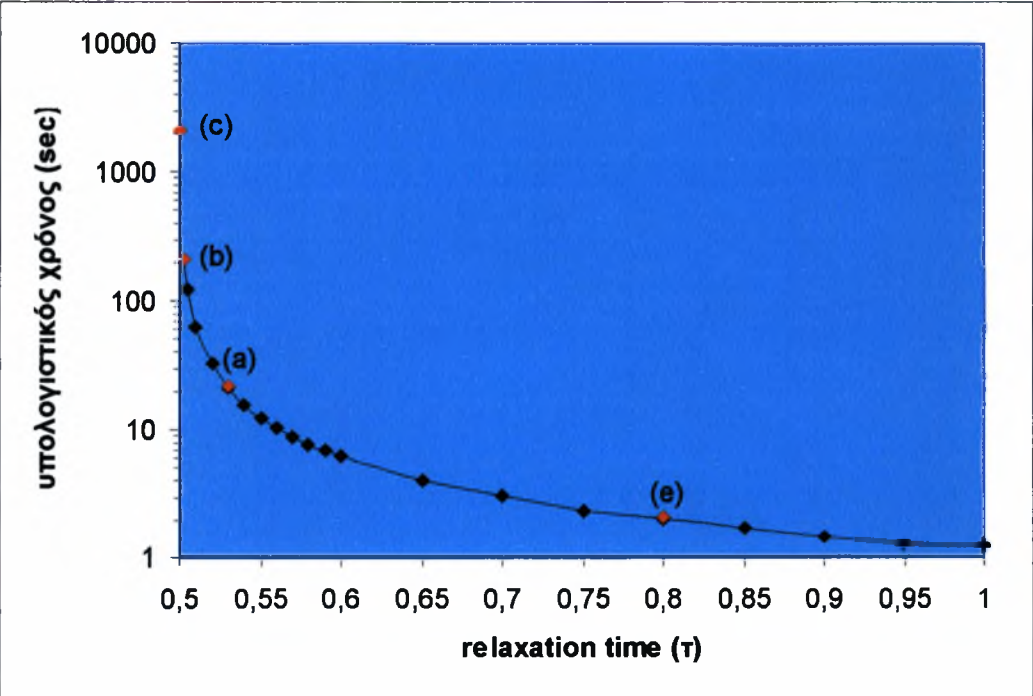
Σχήμα 4.9 Ακρίβεια λύσης συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων για τα ρευστά (a) και (e), στη ροή Couette.



Σχήμα 4.10 Ακρίβεια λύσης συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων για τα ρευστά (b) και (c), στη ροή Couette.



Σχήμα 4.11 Αριθμός επαναλήψεων συναρτήσει του πλήθους των κόμβων για τα ρευστά (a), (b), (e) στη ροή Couette.



Σχήμα 4.12 Απαιτούμενος υπολογιστικός χρόνος στη ροή Couette συναρτήσει του χρόνου χαλάρωσης τ , σε επεξεργαστή PII (233 MHz). Συμπεριλαμβάνονται τα ρευστά (a, b, c, e).

4.2.2 Τριγωνικό πλέγμα (ροές Poiseuille & Couette)

Τα δύο προηγούμενα προβλήματα ροών επιλύθηκαν και στο τριγωνικό (εξαγωνικό) πλέγμα 7 κατευθύνσεων (FHP). Τα δεδομένα των προβλημάτων είναι τα ίδια ακριβώς με αυτά που χρησιμοποιήθηκαν και στο τετραγωνικό πλέγμα. Υπενθυμίζουμε πως οι σχέσεις που ισχύουν για τις συναρτήσεις κατανομής σε κατάσταση ισορροπίας είναι οι ακόλουθες:

$$f_0^{eq} = d_0 - \rho u^2 = a\rho - \rho u^2 \quad (4.10)$$

(για τα σωματίδια σε ηρεμία, όπου a μια ρυθμιζόμενη παράμετρος, ρ η μακροσκοπική πυκνότητα και u η μακροσκοπική ταχύτητα)

$$f_i^{eq} = d + \frac{1}{3}\rho[(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + 2(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{1}{2}u^2] = \frac{\rho - a\rho}{6} + \frac{1}{3}\rho[(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + 2(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{1}{2}u^2] \quad (4.11)$$

(για τα κινούμενα σωματίδια στις 6 κατευθύνσεις του πλέγματος)

Εάν ο λόγος των σωματιδίων σε ηρεμία και των κινούμενων σωματιδίων οριστεί ως

$\lambda = \frac{d_0}{d}$, η πίεση προσδιορίζεται από την ακόλουθη καταστατική εξίσωση:

$$p = 3d = \frac{(1-a)\rho}{2} = \frac{3}{\lambda+6}\rho \quad (4.12)$$

και η ταχύτητα του ήχου είναι:

$$c_s^2 = \frac{1-a}{2} = \frac{3}{\lambda+6} \quad (4.13)$$

Το κινηματικό ιξώδες σχετίζεται με τον χρόνο χαλάρωσης σύμφωνα με την εξίσωση:

$$\nu = \frac{2\tau-1}{8} \delta \quad (4.14)$$

Και εδώ, ο χρόνος χαλάρωσης δεν μπορεί να είναι μικρότερος από 0.5 προκειμένου να έχουμε θετικό κινηματικό ιξώδες. Η περιοχή τιμών του τ είναι (0.5, 1] και τα περισσότερα ρευστά δίνουν τιμές κοντά στο 0.5. Το διάγραμμα του Σχήματος 4.6 ισχύει και στο τριγωνικό πλέγμα, όπως επίσης και όσα αναφέραμε για το τετραγωνικό πλέγμα.

Πρέπει να σημειώσουμε εδώ πως τα σωματίδια που βρίσκονται σε ηρεμία στη μέθοδο Lattice Boltzmann έχουν το ρόλο μιας αποθήκης σωματιδίων. Όταν η μακροσκοπική ταχύτητα πάρει μεγαλύτερες τιμές, τα ακίνητα σωματίδια μετατρέπονται σε κινούμενα και αντιστρόφως. Μεγαλύτερες τιμές του λόγου $\lambda = \frac{d_0}{d}$ σημαίνουν ότι ένα μεγαλύτερο κλάσμα ακίνητων σωματιδίων στην πυκνότητα

συμπεριφέρεται όπως ένα ρευστό το οποίο είναι λιγότερο «στερεό» και περισσότερο εύκαμπτο (η συμπιεστότητα είναι μεγαλύτερη). Στο τετραγωνικό πλέγμα αντιστοιχεί $\lambda = \frac{d_0}{d} = 4$. Το λ παίρνει ακέραιες τιμές μεγαλύτερες της μονάδας και μια συνηθισμένη περιοχή τιμών είναι από 1 μέχρι 10.

Όπως προαναφέραμε, δεν υπήρξαν αξιοσημείωτες διαφορές μεταξύ των δύο μοντέλων ταχυτήτων, τόσο για τη ροή Couette όσο και για τη ροή Poiseuille. Παρόλα αυτά, το τετραγωνικό πλέγμα είναι καλύτερο από το εξαγωνικό σε προσομοιώσεις τέτοιων ροών (όπως και στην προσομοίωση ροής σε ορθογωνική κοιλότητα) επειδή τα σύνορα προσαρμόζονται καλύτερα στο τετραγωνικό. Η μόνη διαφορά είναι ότι στο τριγωνικό πλέγμα, για να συγκλίνει ο αλγόριθμος μέχρι την τελική λύση, απαιτήθηκαν 10 – 20% περισσότερα βήματα, ενώ ο υπολογιστικός χρόνος ήταν περίπου ο ίδιος. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι έχουμε μικρότερο πλήθος μικροσκοπικών ταχυτήτων ανά κόμβο και απλούστερα εκφρασμένες συνοριακές συνθήκες, άρα και μικρότερο πλήθος πράξεων από τον υπολογιστή, ενώ για να φτάσει ο αλγόριθμος τη δεδομένη ακρίβεια της λύσης πρέπει να κάνει περισσότερα βήματα λόγω της μικρότερης πυκνότητας των κατευθύνσεων ανά κόμβο.

4.3 Υλοποίηση συνοριακών συνθηκών με χρήση της συνθήκης bounce – back.

Οι συνοριακές συνθήκες στα περισσότερα προβλήματα ισοθερμοκρασιακών διδιάστατων ροών που επιλύονται αριθμητικά με τη μέθοδο Lattice Boltzmann μπορούμε να πούμε ότι κατατάσσονται σε τέσσερις κατηγορίες: (I) σταθερό (ακίνητο) τοίχωμα, (II) κινούμενο τοίχωμα, (III) τομή δύο συνόρων (τοιχωμάτων), (IV) συνοριακή συνθήκη πίεσης (η οποία δεν εφαρμόζεται στα προβλήματα που εξετάζουμε) [12]. Στη ροή Poiseuille έχουμε την περίπτωση (I) στο σύνορο, στη ροή Couette τις περιπτώσεις (I) και (II), και στη ροή σε κοιλότητα (Cavity Flow) τις περιπτώσεις (I),(II) και (III). Η συνοριακή συνθήκη μη-ολίσθησης που εφαρμόζεται σε ένα ακίνητο τοίχωμα και στην οποία μηδενίζονται οι ταχύτητες των κόμβων που βρίσκονται πάνω στο τοίχωμα, στη μέθοδο LB υλοποιείται με τη συνθήκη bounce-back όπου όλα τα σωματίδια που συγκρούονται με το τοίχωμα ανακλώνται προς τα πίσω στην κατεύθυνση με την οποία το προσέγγισαν. Παρακάτω θα μελετήσουμε τη μαθηματική εφαρμογή στις τρεις κατηγορίες συνόρων που προαναφέραμε κάνοντας χρήση του τετραγωνικού πλέγματος 9 ταχυτήτων.

(I) Σταθερό τοίχωμα

Ας θεωρήσουμε το σταθερό οριζόντιο τοίχωμα του Σχ.4.13, το οποίο μπορεί να είναι το κάτω τοίχωμα στη ροή Poiseuille, Couette ή Cavity Flow. Ένας κόμβος K βρίσκεται πάνω στο τοίχωμα. Μετά τη ροή (streaming) κατά τη διαδικασία επίλυσης, πρέπει να προσδιοριστούν τα f_2, f_3, f_4 . Κάνοντας χρήση της συνθήκης bounce – back έχουμε:

$$f_3 = f_7 \quad (4.15)$$

$$\sum_0^8 f_i e_{ix} = 0 \Rightarrow f_1 + f_2 - f_4 - f_5 - f_6 + f_8 = 0 \quad (4.16)$$

$$\sum_0^8 f_i e_{iy} = 0 \Rightarrow f_2 + f_3 + f_4 - f_6 - f_7 - f_8 = 0 \quad (4.17)$$

$$(4.17) \stackrel{(4.15)}{\Rightarrow} f_2 + f_4 - f_6 - f_8 = 0 \Rightarrow f_2 = f_6 + f_8 - f_4 \quad (4.18)$$

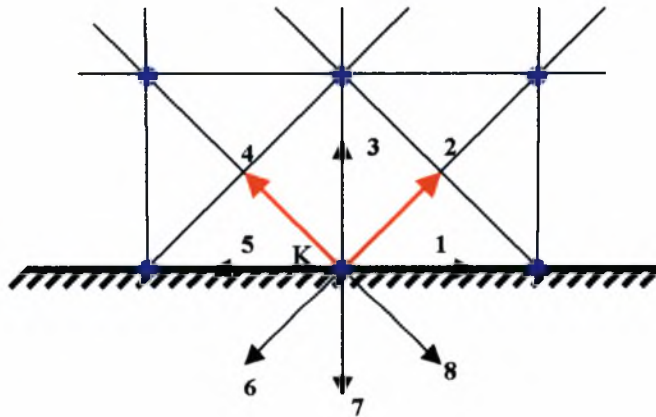
Επιλύοντας την (4.16) ως προς f_4 και αντικαθιστώντας στην (4.18) έχουμε:

$$f_2 = f_6 - \frac{1}{2}(f_1 - f_5) \quad (4.19)$$

Αντικαθιστώντας τη (4.18) στην (4.16) παίρνουμε:

$$f_4 = f_8 + \frac{1}{2}(f_1 - f_5) \quad (4.20)$$

Οι σχέσεις (4.15), (4.19) και (4.20) προσδιορίζουν τα άγνωστα f_i στον κόμβο K .



Σχήμα 4.13 Κόμβος (K) σε σταθερό οριζόντιο τοίχωμα.

Στην περίπτωση που έχουμε κατακόρυφο τοίχωμα (πχ. στη ροή σε κοιλότητα) και κόμβοι του πλέγματός μας βρίσκονται πάνω σε αυτό, εργαζόμαστε με ανάλογο τρόπο

γνωρίζοντας πως τα άγνωστα f_i που πρέπει να προσδιορίσουμε είναι τα f_1, f_2, f_8 (βλ. Σχ. 4.14).

Από τη συνθήκη bounce – back έχουμε:

$$f_1 = f_5 \quad (4.21)$$

Από τις σχέσεις (4.16), (4.21) παίρνουμε:

$$f_2 = f_4 + f_6 - f_8 \quad (4.22)$$

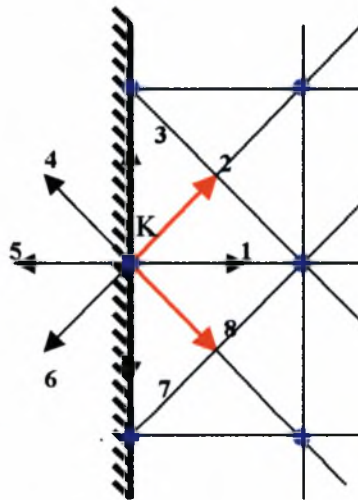
Λύνοντας την (4.17) ως προς f_8 και αντικαθιστώντας στην (4.22), παίρνουμε την πρώτη ζητούμενη σχέση:

$$f_2 = f_6 - \frac{1}{2}(f_3 - f_7) \quad (4.23)$$

Αντικαθιστώντας την (4.22) στην (4.17) και λύνοντας ως προς f_8 λαμβάνουμε τη δεύτερη ζητούμενη σχέση:

$$f_8 = f_4 + \frac{1}{2}(f_3 - f_7) \quad (4.24)$$

Οι σχέσεις (4.21), (4.23) και (4.24) προσδιορίζουν τα άγνωστα f_i στον κόμβο K .



Σχήμα 4.14 Κόμβος (K) σε σταθερό κατακόρυφο τοίχωμα.

(II) Κινούμενο τοίχωμα

Ας θεωρήσουμε το οριζόντιο κινούμενο τοίχωμα του Σχ.4.15, το οποίο μπορεί να είναι το πάνω τοίχωμα στη ροή Couette ή Cavity Flow, και το οποίο

κινείται με ταχύτητα U_{out} . Ένας κόμβος K βρίσκεται πάνω στο τοίχωμα. Μετά τη ροή (streaming) κατά τη διαδικασία επίλυσης, πρέπει να προσδιοριστούν τα f_6, f_7, f_8 . Κάνοντας χρήση της συνθήκης bounce – back έχουμε:

$$f_7 = f_3 \quad (4.25)$$

Επιπλέον, ισχύει:

$$\sum_0^8 f_i e_{ix} = \rho U_{out} \Rightarrow f_1 + f_2 - f_4 - f_5 - f_6 + f_8 = \rho U_{out} \quad (4.26)$$

$$\sum_0^8 f_i e_{iy} = 0 \Rightarrow f_2 + f_3 + f_4 - f_6 - f_7 - f_8 = 0 \stackrel{(4.25)}{\Rightarrow} f_8 = f_2 + f_4 - f_6 \quad (4.27)$$

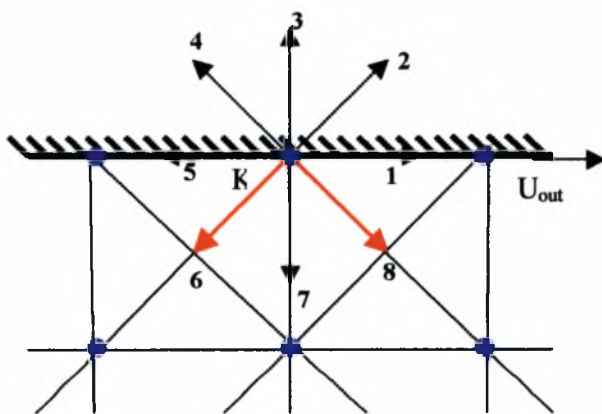
Αντικαθιστώντας τη σχέση (4.27) στην (4.26) και λύνοντας ως προς f_6 παίρνουμε τη ζητούμενη σχέση:

$$f_6 = f_2 + \frac{1}{2}(f_1 - f_5) - \frac{1}{2}\rho U_{out} \quad (4.28)$$

Τέλος, αντικαθιστώντας τη σχέση (4.28) στην (4.27) και λύνοντας ως προς f_8 λαμβάνουμε τη σχέση:

$$f_8 = f_4 - \frac{1}{2}(f_1 - f_5) + \frac{1}{2}\rho U_{out} \quad (4.29)$$

Οι σχέσεις (4.25), (4.28) και (4.29) προσδιορίζουν τα άγνωστα f_i στον κόμβο K .



Σχήμα 4.15 Κόμβος (K) σε οριζόντιο κινούμενο τοίχωμα με ταχύτητα U_{out} .

(III) Τομή δύο συνόρων

Ας θεωρήσουμε το σημείο τομής δύο κάθετα τεμνόμενων τοιχωμάτων, το οποίο αποτελεί και κόμβο K του πλέγματος, όπως εικονίζεται στο Σχ.4.16. Το σημείο αυτό μπορεί να είναι η κάτω αριστερή γωνία της κοιλότητας στο πρόβλημα Cavity

Flow. Μετά τη ροή (streaming) κατά τη διαδικασία επίλυσης, πρέπει να προσδιοριστούν τα f_1, f_2, f_3, f_4, f_8 . Κάνοντας χρήση της συνθήκης bounce – back έχουμε:

$$f_3 = f_7 \quad (4.30)$$

$$f_1 = f_5 \quad (4.31)$$

$$(4.16) \stackrel{(4.31)}{\Rightarrow} f_2 - f_4 + f_8 = f_6 \quad (4.32)$$

$$(4.17) \stackrel{(4.30)}{\Rightarrow} f_2 + f_4 - f_8 = f_6 \quad (4.33)$$

Από τις δύο τελευταίες σχέσεις προκύπτει ότι:

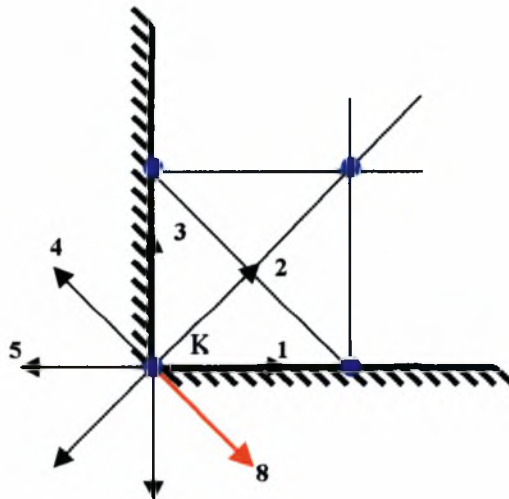
$$f_2 = f_6 \quad (4.34)$$

$$f_4 = f_8 \quad (4.35)$$

Πρέπει να βρεθεί μια ακόμη σχέση που να προσδιορίζει τα f_4 και f_8 . Η σχέση αυτή προκύπτει ως εξής:

$$\sum_{i=0}^8 f_i = \rho \Rightarrow f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + f_5 + f_6 + f_7 + f_8 = \rho \stackrel{(4.35)}{\Rightarrow} f_8 = \frac{1}{2}[\rho - (f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_5 + f_6 + f_7)] \quad (4.36)$$

Οι σχέσεις (4.30), (4.31), (4.34), (4.35), (4.36) προσδιορίζουν τα άγνωστα f_i στον κόμβο K .



Σχήμα 4.16 Κόμβος (K) στο σημείο τομής δύο κάθετα τεμνόμενων συνόρων.

Σημειώνουμε πως αν το σημείο τομής των δύο συνόρων είναι μεταξύ ενός κινούμενου και ενός ακίνητου τοιχώματος, ισχύουν οι αμέσως προηγούμενες σχέσεις

που προέκυψαν. Το σημείο τομής τους μπορεί να θεωρηθεί πως ανήκει είτε στο κινούμενο τοίχωμα, είτε στο ακίνητο, χωρίς αξιοσημείωτη διαφορά στα τελικά αριθμητικά αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Με τον ίδιο τρόπο εργαζόμαστε για τις συνοριακές συνθήκες και στο τριγωνικό (εξαγωνικό) πλέγμα 7 ταχυτήτων για διδιάστατα προβλήματα, αλλά και στο κυβικό πλέγμα 15 ταχυτήτων για τριδιάστατα προβλήματα. Όπως έχουμε προαναφέρει, η ακρίβεια του συγκεκριμένου τρόπου υλοποίησης των συνοριακών συνθηκών είναι 1^{ης} τάξεως, ωστόσο έχουν προταθεί πιο πολύπλοκα συνοριακά μοντέλα όπου η ακρίβειά τους είναι 2^{ης} τάξεως (πχ. περιοδικές συνοριακές συνθήκες).

Κεφάλαιο 5.

Διδιάστατη Ροή σε Κοιλότητα

5.1 Εισαγωγή

Το πρόβλημα που μελετάται είναι η διδιάστατη ιξώδης ροή σε κοιλότητα ελεγχόμενη από τις εξισώσεις Navier – Stokes. Ένα ασυμπίεστο ρευστό περικλείεται από μια τετράγωνη κοιλότητα και η ροή καθοδηγείται από μια ομοιόμορφη σταθερή μετατόπιση του άνω συνόρου. Η κίνηση του ρευστού που παράγεται σε αυτή την κοιλότητα αποτελεί ένα παράδειγμα προβλημάτων κλειστών ροϊκών γραμμών, τα οποία είναι μεγάλης θεωρητικής σημασίας επειδή αποτελούν μέρος ενός ευρύτερου πεδίου σταθερών, ξεχωριστών ροών. Για το συγκεκριμένο είδος ροής υπάρχει άφθονη βιβλιογραφία που αναφέρεται σε φαινόμενα δινών σε πολλές κλίμακες εξαρτώμενες από τον αριθμό Reynolds, Re . Αριθμητικές μέθοδοι για την επίλυση των εξισώσεων Navier – Stokes συχνά ελέγχονται και αποτιμώνται στις ροές σε κοιλότητες εξαιτίας της πολυπλοκότητας των ροών αυτών.

Η ανάλυση που γίνεται στο παρόν κεφάλαιο έχει στόχο να επιδείξει ορισμένες από τις βασικές δυνατότητες της μεθόδου Lattice Boltzmann. Εκτενείς συγκρίσεις με άλλες αριθμητικές λύσεις της διδιάστατης ροής σε κοίλωμα δείχνουν ότι η μέθοδος Lattice Boltzmann παρέχει ακριβή αποτελέσματα για μια μεγάλη περιοχή τιμών του αριθμού Re . Σκοπός της μελέτης αυτής είναι η επαλήθευση της ακρίβειας και της φυσικής πιστότητας της μεθόδου Lattice Boltzmann έτσι ώστε να κατανοηθούν τα οφέλη, τα μειονεκτήματα και οι περιορισμοί που αφορούν τη νέα αυτή μέθοδο.

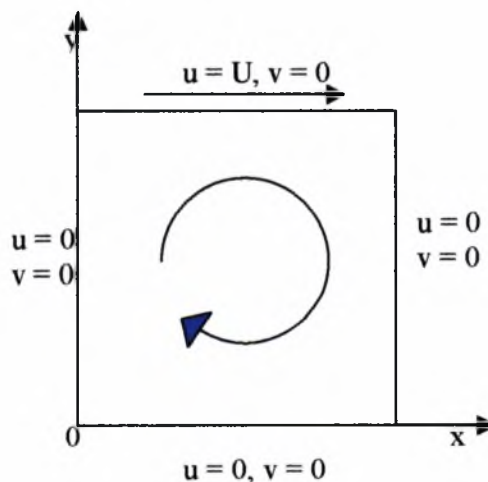
Οι περισσότερες αριθμητικές λύσεις της διδιάστατης ροής σε κοίλωμα χρησιμοποιούν μια vorticity – stream συνάρτηση και διακριτοποιούν τις ασυμπίεστες, μόνιμες, γραμμικές ή μη γραμμικές εξισώσεις Navier – Stokes χρησιμοποιώντας μεθόδους multigrid, πεπερασμένων διαφορών, πεπερασμένων στοιχείων και παραλλαγές αυτών. Προηγούμενες εργασίες που ανασκοπήθηκαν από τον O. Burggraf [49], δείχνουν πως οι αριθμητικές λύσεις των μη – γραμμικών εξισώσεων Navier – Stokes για αριθμό Re μέχρι 400 εμφανίζουν μια μεγάλη κύρια δίνη και δύο δευτερεύουσες δίνες στις κάτω γωνίες. Πιο πρόσφατες εργασίες δείχνουν πως τριτογενείς δίνες σχηματίζονται κοντά στις γωνίες του πυθμένα για μεγαλύτερους αριθμούς Re. Τα παρόντα αποτελέσματα που προέκυψαν με τη μέθοδο Lattice Boltzmann συγκρίνονται με αυτά που προέκυψαν από τους Vanka [46], Schreiber & Keller [47], Ghia *et al* [48], Hou *et al* [8]. Οι Ghia *et al* υπολόγισαν τις αριθμητικές λύσεις μέχρι $Re = 10000$ χρησιμοποιώντας πλέγμα 257×257 και την coupled strongly implicit multigrid μέθοδο για την vorticity – stream συνάρτηση. Η εργασία τους αποτελεί την πιο περιεκτική μέχρι σήμερα μελέτη της ροής σε κοιλότητα.

5.2 Περιγραφή του προβλήματος

Στην παρούσα προσομοίωση χρησιμοποιούνται καρτεσιανές συντεταγμένες με την αρχή των αξόνων τοποθετημένη στην κάτω αριστερή γωνία (Σχ.5.1). Το πάνω όριο κινείται από αριστερά προς τα δεξιά με ταχύτητα U . Η κοιλότητα διαθέτει 256 κόμβους σε κάθε πλευρά. Αρχικά, οι ταχύτητες σε όλους τους κόμβους, εκτός αυτών που βρίσκονται στο άνω όριο, τίθενται ίσες με μηδέν. Η x – ταχύτητα στο άνω σύνορο είναι U και η y – ταχύτητα είναι μηδέν. Το πλέγμα που χρησιμοποιείται είναι το τετραγωνικό 9 ταχυτήτων, όπως εικονίζεται στο Σχ.2.1. Αρχικά τίθενται ομοιόμορφη σωματιδιακή πυκνότητα έτσι ώστε το κινούμενο σωματίδιο τύπου I(κινείται στις οριζόντιες και κάθετες κατευθύνσεις) να έχει κλάσμα πυκνότητας $d = 0.3$ ανά κατεύθυνση. Το κινούμενο σωματίδιο τύπου II(κινείται στις διαγώνιες κατευθύνσεις) έχει κλάσμα πυκνότητας $d/4$ ανά κατεύθυνση και το σωματίδιο που βρίσκεται σε ηρεμία έχει πυκνότητα $4d$. Επομένως, η συνολική πυκνότητα σε κάθε κόμβο είναι $\rho = 9d = 2.7$. Χρησιμοποιώντας μια αρχικά ομοιόμορφη πυκνότητα και τις ταχύτητες που αναφέραμε παραπάνω, η συνάρτηση κατανομής ισορροπίας των σωματιδίων, f_{0i} , υπολογίζεται από την Εξ.2.33. Η εξέλιξη της f_{0i} μπορεί να βρεθεί με μια διαδοχή διαδικασιών ροής (= μετακίνηση σωματιδίων, streaming) και

χαλάρωσης (relaxation). Μετά τη μετακίνηση σωματιδίων, η ταχύτητα στο άνω σύνορο επαναφέρεται στην αρχική ομοιόμορφη ταχύτητα. Στο τέλος κάθε κυκλικής διαδικασίας ροής και σύγκρουσης (collision), η $f_{\alpha i}$ στο άνω σύνορο τίθεται στην κατάσταση ισορροπίας. Η συνοριακή συνθήκη αναπήδησης (bounce – back boundary condition) τίθεται και στα 3 ακίνητα τοιχώματα. Σημειώνουμε ότι οι συνοριακές συνθήκες του προβλήματος θα μπορούσαν να καταταχθούν σε τρεις κατηγορίες: α) ακίνητο τοίχωμα, β) κινούμενο σύνορο, γ) γωνιακά σημεία (σημεία τομής δύο συνόρων). Τα δύο άνω γωνιακά σημεία θεωρούνται πως ανήκουν στα ακίνητα πλαϊνά τοιχώματα. Οι δοκιμές δείχνουν πως δεν υπάρχει αξιοσημείωτη διαφορά αν θεωρούνταν πως ανήκουν στο άνω κινούμενο σύνορο. Η ομοιόμορφη ταχύτητα του άνω ορίου που χρησιμοποιείται στις προσομοιώσεις είναι $U = 0.1$, εκτός του $Re = 100$ όπου $U = 0.01$. Ο αριθμός Re δίνεται από τη σχέση $Re = \frac{UL_N}{\nu}$, όπου U η ομοιόμορφη ταχύτητα του άνω συνόρου, L_N το πλήθος των πλεγματικών διαστημάτων κατά μήκος μιας πλευράς της κοιλότητας και ν το κινηματικό ιξώδες που δίνεται από τη σχέση $\nu = \frac{2\tau - 1}{6}$, όπου τ ο χρόνος χαλάρωσης (relaxation time).

Όλα τα αποτελέσματα έχουν κανονικοποιηθεί για να επιτρέπουν τη σύγκριση μεταξύ της παρούσας εργασίας και άλλων αποτελεσμάτων που βασίζονται σε μια μοναδιαία τετράγωνη κοιλότητα με μοναδιαία ταχύτητα στο άνω σύνορο.



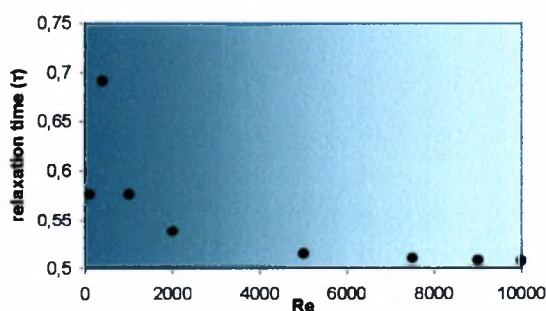
Σχήμα 5.1 Διδιάστατη ροή σε κοιλότητα

5.3 Συγκρίσεις μεταξύ της μεθόδου LB και των συμβατικών μεθόδων

Οι αριθμητικές προσομοιώσεις που εκτελέστηκαν για τη ροή σε κοιλότητα κάνοντας χρήση της μεθόδου Lattice Boltzmann έγιναν για αριθμούς Reynolds $Re = 100, 400, 1000, 2000, 5000, 7500$ σε πλέγμα **256x256** (256 κόμβους και 255 πλεγματικά διαστήματα σε κάθε πλευρά). Οι εξαρτημένες μεταβλητές της ροϊκής συνάρτησης, της ταχύτητας και της πίεσης υπολογίζονται χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων, $f_{i,j}$. Επίσης, υπολογίζεται και ο συντελεστής οπισθέλκουσας της κινούμενης πλάκας του άνω συνόρου. Σε όλες τις περιπτώσεις επιτεύχθηκαν μόνιμες συνθήκες.

Το κριτήριο σύγκλισης του αλγόριθμου ήταν το απόλυτο σφάλμα $|u_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^n| < 10^{-11}$ δηλαδή υπολογίζαμε τη μέγιστη απόλυτη διαφορά της προηγούμενης τιμής της ταχύτητας από τη νέα τιμή σε όλο το πεδίο ροής και όταν ήταν ίση με 10^{-11} (ή 10^{-12} για τις μεγαλύτερες τιμές του αριθμού Re), φτάναμε στις μόνιμες συνθήκες του προβλήματος. Ο αριθμός των επαναλήψεων για κάθε αριθμό Re αναφέρεται στα Σχήματα 5.2, 5.3.

Θα πρέπει επίσης να προσθέσουμε πως για $Re > 7500$ ο κώδικας δεν λειτουργεί, παρόλο που ο χρόνος χαλάρωσης παίρνει τιμές μεγαλύτερες του 0.5, όπως απεικονίζεται στο Σχ. 5.2. Για το σκοπό αυτό έχει αναπτυχθεί το μοντέλο LB Subgrid Model [3 – §6], το οποίο επιλύει το πρόβλημα με πολύ μεγαλύτερες τιμές του αριθμού Re . Τυρβώδης ροή παρουσιάζεται για $Re \geq 10^6$ και επιλύεται αρκετά ικανοποιητικά με το συγκεκριμένο μοντέλο.



Σχήμα 5.2 Χρόνος χαλάρωσης συναρτήσει του αριθμού Re .

5.3.1 Ροϊκή συνάρτηση – Ροϊκές γραμμές

Τα Σχήματα 5.3, 5.4 απεικονίζουν τις ροϊκές γραμμές για τους αριθμούς Re που προαναφέραμε. Τα σχήματα αυτά παρέχουν μια καθαρή εικόνα της συνολικής

ροής και της επίδρασης του αριθμού Re στη δομή των σταθερών δινών στην κοιλότητα. Μαζί με την κύρια, κεντρική δίνη, αναπτύσσονται και δύο αντίθετα περιστρεφόμενες δίνες πολύ μικρότερης ισχύος στις κάτω γωνίες του κοιλώματος. Για $Re = 2000$, μια τρίτη δευτερεύουσα δίνη εμφανίζεται στην άνω αριστερή γωνία. Αυτή δημιουργείται σε μια κρίσιμη τιμή του αριθμού Re περίπου ίση με 1200. Για $Re \geq 5000$, εμφανίζεται μια τριτογενής δίνη στην κάτω δεξιά γωνία. Μια σειρά από δίνες με εκθετικά μειωμένη ισχύ έχει προλεχθεί από τους Ghia *et al.*

Για μικρές τιμές του αριθμού Re , το κέντρο της κύριας δίνης τοποθετείται στο οριζόντιο μέσον και περίπου στο $1/3$ καθ' ύψος από την κορυφή. Καθώς αυξάνει ο αριθμός Re , το κέντρο της κύριας δίνης μετακινείται προς τα δεξιά και η δίνη γίνεται πιο κυκλική. Τελικά, το κέντρο μετακινείται προς το γεωμετρικό κέντρο της κοιλότητας με την περαιτέρω αύξηση του αριθμού Re και σταθεροποιείται στην οριζόντια θέση x για $Re \geq 5000$. Η μετακίνηση της θέσης της κύριας δίνης συναρτήσει του αριθμού Re απεικονίζεται στο Σχ.5.5, συγκριτικά με τα αποτελέσματα των Ghia *et al.*

Όλα τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται έχουν προκύψει με ομοιόμορφη ταχύτητα στο άνω σύνορο $U = 0.1$ εκτός για $Re = 100$ όπου $U = 0.01$. Τα αποτελέσματά μας συμφωνούν για $Re \leq 1000$, αλλά διαφέρουν ελάχιστα για υψηλότερες τιμές του Re . Οι θέσεις των κέντρων των δινών που προέκυψαν με τη μέθοδο Lattice Boltzmann συμφωνούν σε μεγάλο βαθμό με αυτές των Ghia *et al* και των Hou *et al.* Στους Πίνακες 5.1, 5.2 αναγράφονται τα σχετικά αποτελέσματα.

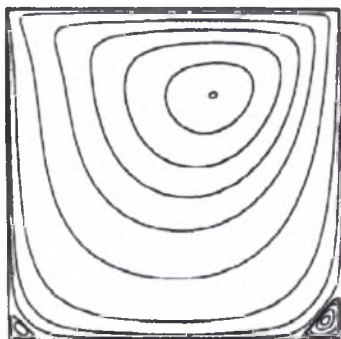
Σε αντίθεση με τις μεθόδους πεπερασμένων διαφορών και πεπερασμένων στοιχείων, όπου ξεκινάνε την επίλυση των χρονικά σταθερών μερικών διαφορικών εξισώσεων, η παρούσα μέθοδος είναι μια ασταθής χρονικά προσέγγιση στην οποία η λύση εξελίσσεται προς τις μόνιμες συνθήκες. Ο χρόνος που απαιτείται για να φτάσουμε σε μόνιμες συνθήκες εξαρτάται από το πλέγμα που χρησιμοποιούμε, το μέγεθός του (την πυκνότητα των κόμβων), την τιμή του αριθμού Re , την ταχύτητα ώθησης U και τις αρχικές συνθήκες. Σε όλες τις περιπτώσεις, επιτύχαμε μόνιμες συνθήκες. Λαμβάνοντας υπ' όψη την κινητική, συμπιεστή και χρονικά μη μόνιμη φύση της μεθόδου Lattice Boltzmann, η εξαιρετικά καλή συμφωνία των αποτελεσμάτων μας με αυτά των εντελώς διαφορετικών μεθόδων όπως των Ghia *et al.* είναι πολύ ενθαρρυντική.

$$Re = 100$$

$$U = 0.01$$

$$\tau = 0.5765$$

~ 400000 επαναλ.

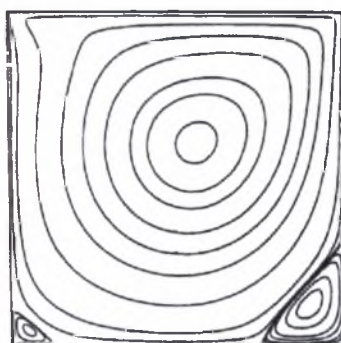


$$Re = 400$$

$$U = 0.1$$

$$\tau = 0.69125$$

~ 350000 επαναλ.

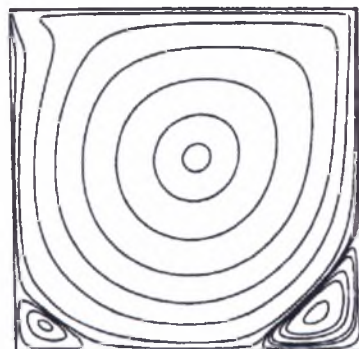


$$Re = 1000$$

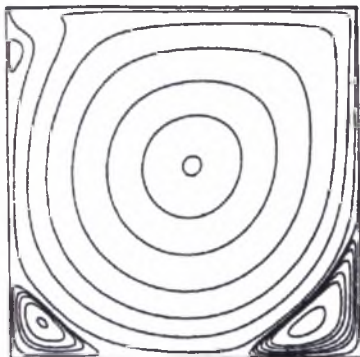
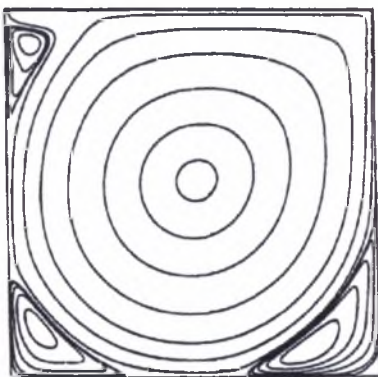
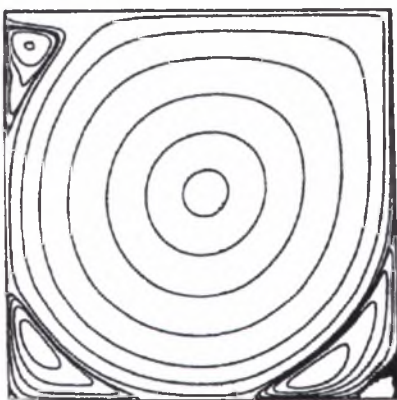
$$U = 0.1$$

$$\tau = 0.5765$$

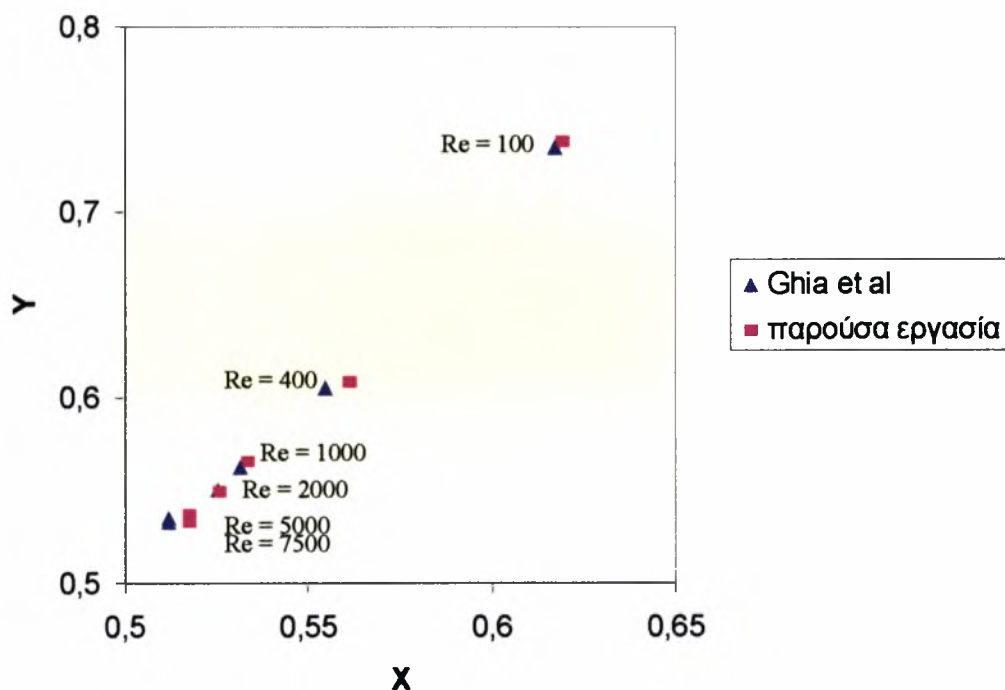
~ 400000 επαναλ.



Σχήμα 5.3 Ροϊκές γραμμές της ροής σε ορθογωνική κοιλότητα, για $Re = 100$, 400 και 1000 .

$Re = 2000$ $U = 0.1$ $\tau = 0.53825$ ~ 500000 επαναλ. $Re = 5000$ $U = 0.1$ $\tau = 0.5153$ ~ 600000 επαναλ. $Re = 7500$ $U = 0.1$ $\tau = 0.5102$ ~ 750000 επαναλ.

Σχήμα 5.4 Ροϊκές γραμμές της ροής σε ορθογωνική κοιλότητα για $Re = 2000$, 5000 και 7500 .



Σχήμα 5.5 Η θέση του κέντρου της κύριας δίνης για διαφορετικές τιμές του αριθμού Re . Η κάτω αριστερή γωνία του σχήματος αυτού είναι το γεωμετρικό κέντρο της κοιλότητας.

Re		κύρια δίνη		κάτω αριστερή δίνη		κάτω δεξιά δίνη	
		x	y	x	y	x	y
100	A	0.6188	0.7375	0.0375	0.0313	0.9375	0.0563
	B	0.6172	0.7344	0.0313	0.0391	0.9453	0.0625
	C	0.6167	0.7417	0.0333	0.0250	0.9417	0.0500
	D	0.6196	0.7373	0.0392	0.0353	0.9451	0.0627
	E	0.6192	0.7374	0.0394	0.0352	0.9451	0.0628
400	A	0.5563	0.6000	0.0500	0.0500	0.8875	0.1188
	B	0.5547	0.6055	0.0508	0.0469	0.8906	0.1250
	C	0.5571	0.6071	0.0500	0.0429	0.8857	0.1143
	D	0.5608	0.6078	0.0549	0.0510	0.8902	0.1255
	E	0.5611	0.6080	0.0543	0.0514	0.8903	0.1257
1000	A	0.5438	0.5625	0.0750	0.0813	0.8625	0.1063
	B	0.5313	0.5625	0.0859	0.0781	0.8594	0.1094
	C	0.5286	0.5643	0.0857	0.0714	0.8643	0.1071
	D	0.5333	0.5647	0.0902	0.0784	0.8667	0.1137
	E	0.5332	0.5650	0.0906	0.0786	0.8670	0.1138
2000	A	0.5250	0.5500	0.0875	0.1063	0.8375	0.0938
	D	0.5255	0.5490	0.0902	0.1059	0.8471	0.0980
	E	0.5256	0.5489	0.0903	0.1061	0.8472	0.0977
5000	A	0.5125	0.5313	0.0625	0.1563	0.8500	0.0813
	B	0.5117	0.5352	0.0703	0.1367	0.8086	0.0742
	D	0.5176	0.5373	0.0784	0.1373	0.8078	0.0745
	E	0.5174	0.5369	0.0779	0.1372	0.8076	0.0742
7500	B	0.5117	0.5322	0.0645	0.1504	0.7813	0.0625
	D	0.5176	0.5333	0.0706	0.1529	0.7922	0.0667
	E	0.5175	0.5331	0.0701	0.1523	0.7921	0.0668

Πίνακας 5.1 Κέντρα δινών.

A: S. P. Vanka

B: U. Ghia, K. N. Ghia & C. T. Shin

C: R. Schreiber & H. B. Keller

D: S. Hou & Q. Zou, S. Chen, G. Doolen and A. C. Cogley

E: Παρούσα Εργασία

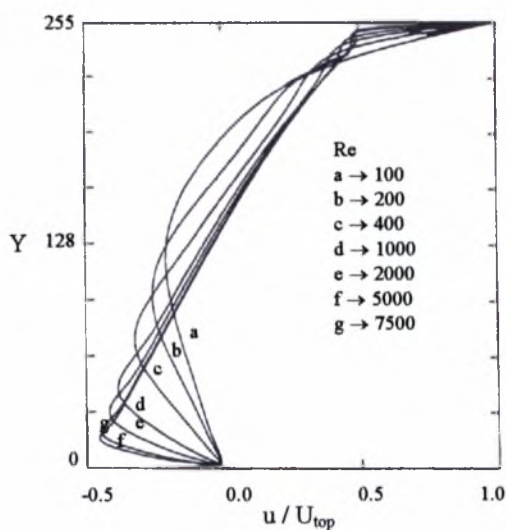
Re		άνω αριστερή δίνη	
		x	y
5000	A	0.0625	0.9102
	B	0.0667	0.9059
	C	0.0663	0.9057
7500	A	0.0664	0.9141
	B	0.0706	0.9098
	C	0.0703	0.9094

Πίνακας 5.2 Κέντρα άνω αριστερών δινών.

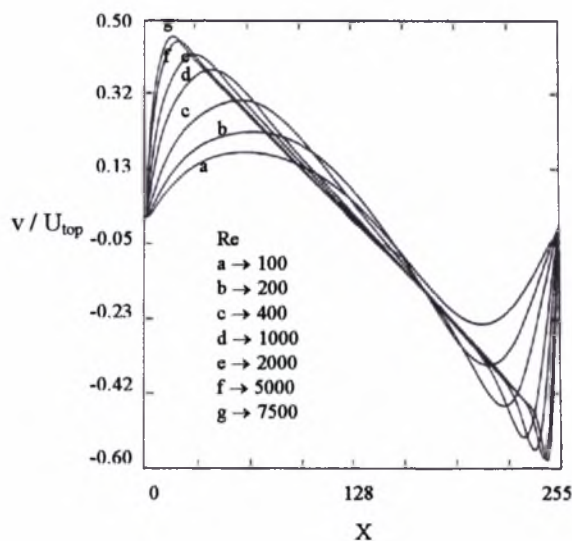
A: U. Ghia, K. N. Ghia & C. T. Shin B: S. Hou & Q. Zou, S. Chen, G. Doolen and A. C. Cogley C: Παρούσα Εργασία

5.3.2 Προφίλ ταχυτήτων

Στα ακόλουθα σχήματα 5.6, 5.7 εικονίζονται τα προφίλ ταχυτήτων κατά μήκος της κατακόρυφης και οριζόντιας κεντρικής γραμμής της κοιλότητας για τις διάφορες τιμές του αριθμού Re . Τα προφίλ ταχυτήτων αλλάζουν από καμπύλα στις χαμηλές τιμές Re σε γραμμικά στις υψηλότερες τιμές Re . Τα σχεδόν γραμμικά προφίλ της ταχύτητας στον κεντρικό πυρήνα της κοιλότητας δείχνουν την περιοχή ομοιόμορφης στροβιλότητας που δημιουργείται στην κοιλότητα σε υψηλότερες τιμές Re . Τα αποτελέσματά μας συμφωνούν με αυτά προηγούμενων εργασιών.



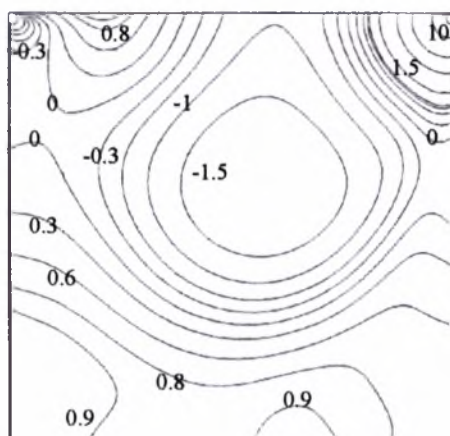
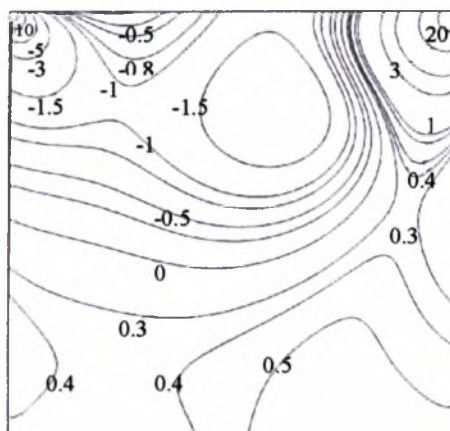
Σχήμα 5.6 Προφίλ x -ταχυτήτων κατά μήκος της κατακόρυφης γεωμετρικής κεντρικής γραμμής της κοιλότητας.



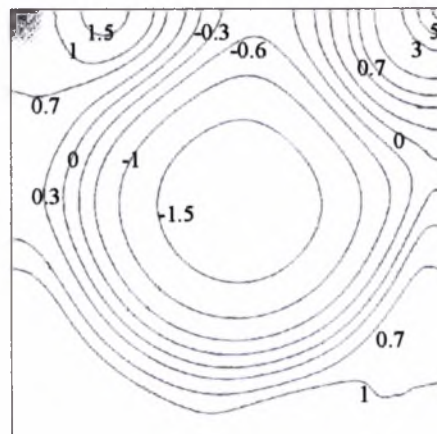
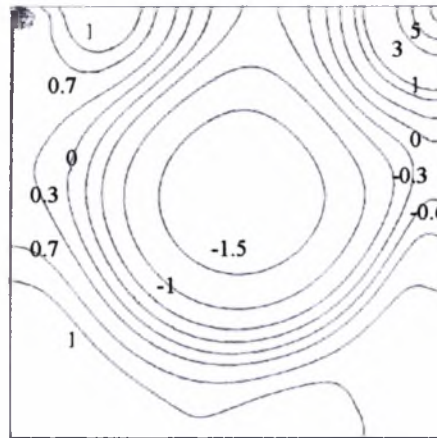
Σχήμα 5.7 Προφίλ y -ταχυτήτων κατά μήκος της κατακόρυφης γεωμετρικής κεντρικής γραμμής της κοιλότητας.

5.3.3 Πίεση

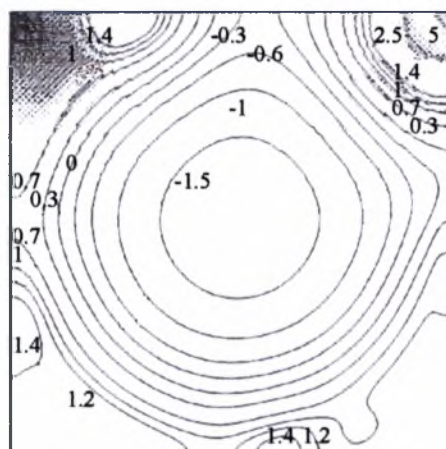
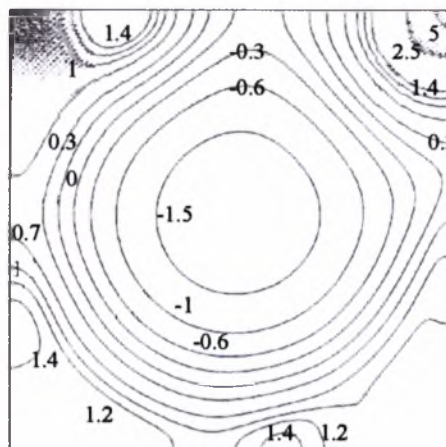
Τα Σχήματα 5.8, 5.9, 5.10 απεικονίζουν την απόκλιση της πίεσης (pressure deviation) στις παρούσες προσομοιώσεις. Αφού η κλίση της πίεσης εμφανίζεται στην εξίσωση Navier – Stokes, οι τιμές της πίεσης μπορούν να διαφέρουν κατά μια σταθερά. Πρώτα υπολογίζεται η διακύμανση της πυκνότητας και έπειτα η απόκλιση της πίεσης ορίζεται ως $c_s^2(\rho - \bar{\rho})$, όπου c_s η ταχύτητα του ήχου και $\bar{\rho}$ η μέση πυκνότητα του ρευστού της κοιλότητας (~ 2.73). Στα σχήματα αυτά, οι τιμές της απόκλισης της πίεσης πολλαπλασιάζονται επί 1000. Ενώ σε άλλες μεθόδους η πίεση υπολογίζεται ολοκληρώνοντας την εξίσωση Navier – Stokes με δεδομένο το πεδίο ταχυτήτων, στη μέθοδο Lattice Boltzmann η πίεση ικανοποιεί την καταστατική εξίσωση των ισόθερμων αερίων όπου η πίεση είναι ανάλογη της πυκνότητας. Η συμφωνία των αποτελεσμάτων με αυτά διαφορετικών μεθόδων αποδεικνύει ότι το μοντέλο Lattice Boltzmann BGK είναι κατάλληλο για την προσομοίωση ασυμπίεστης ισόθερμης ροής.



Σχήμα 5.8 Ισοϋψείς καμπύλες της απόκλισης της πίεσης πολ/μένες επί 1000.
(Από κορυφή $Re = 100, 400$)



Σχήμα 5.9 Ισοϋψείς καμπύλες της απόκλισης της πίεσης πολ/μένες επί 1000.
(Από κορυφή $Re = 1000, 2000$)



Σχήμα 5.10 Ισοϋψείς καμπύλες της απόκλισης της πίεσης πολ/μένες επί 1000.
(Από κορυφή $Re = 5000, 7500$)

5.3.4 Οπισθέλκουσα

Η οπισθέλκουσα δύναμη και ο συντελεστής οπισθέλκουσας του άνω κινούμενου τοιχώματος υπολογίζεται για τις προαναφερθείσες τιμές του αριθμού Re. Η τάση στο κινούμενο τοίχωμα υπολογίζεται από τον τύπο του Νεύτωνα:

$$\tau_{yx} = \mu \frac{\partial u}{\partial y}$$

όπου u η x – συνιστώσα της ταχύτητας και μ το ιξώδες. Η οπισθέλκουσα δύναμη στην επιφάνεια του τοιχώματος, F_d , ορίζεται ως:

$$F_d = \int_0^L \tau_{yx} dx = \int_0^L \mu \frac{\partial u}{\partial y} dx = \mu \sum_{i=1}^{n_x-1} \frac{u(i, n_y) - u(i, n_y - 1)}{\Delta y} \Delta x$$

με :

$$\mu = \rho \nu = \rho_o \nu = 2.7 \cdot \frac{2\tau - 1}{6}$$

όπου n_x ο αριθμός του τελευταίου κόμβου στη x – κατεύθυνση, L το μήκος της τετραγωνικής κοιλότητας και $\Delta y = \Delta x = \frac{L}{n_x - 1}$ το πλεγματικό διάστημα μεταξύ δύο

διαδοχικών κόμβων. Ο συντελεστής οπισθέλκουσας γράφεται ως:

$$C_d = \frac{F_d}{\rho U^2 L}$$

όπου ρ η μέση πυκνότητα του ρευστού και U η ταχύτητα του άνω τοιχώματος. Ο συντελεστής οπισθέλκουσας ελαττώνεται με την αύξηση του αριθμού Re, όπως έχει αποδειχθεί και σε άλλες στρωτές ροές. Το γεγονός αυτό μπορεί ναδειχθεί εισάγοντας τις αδιάστατες ποσότητες:

$$u' = u/U, x' = x/L, y' = y/L$$

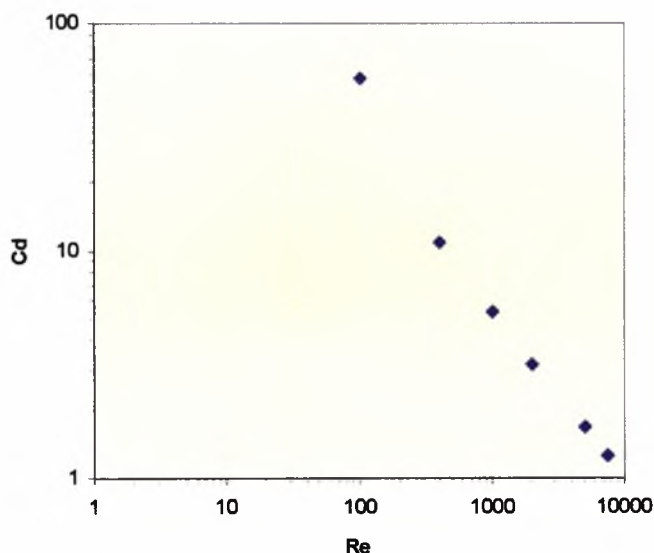
οπότε ο συντελεστής οπισθέλκουσας μπορεί να εκφραστεί ως:

$$C_d = \frac{U \int_0^1 \mu \frac{\partial u'}{\partial y'} dx'}{\rho U^2 L} = \int_0^1 \frac{\mu}{\rho U L} \frac{\partial u'}{\partial y'} dx' = \frac{1}{Re} \int_0^1 \frac{\partial u'}{\partial y'} dx'$$

Τα αποτελέσματα για την οπισθέλκουσα δύναμη και το συντελεστή οπισθέλκουσας αναγράφονται στον παρακάτω Πίνακα 5.3. Στο Σχ. 5.11 απεικονίζεται ο συντελεστής οπισθέλκουσας του άνω κινούμενου τοιχώματος συναρτήσει του αριθμού Re.

Re	100	400	1000	2000	5000	7500
F_d	1.44	0.28	0.15	0.08	0.05	0.03
C_d	56.92	10.87	5.33	3.13	1.68	1.26

Πίνακας 5.3 Οπισθέλκουσα και συντελεστής οπισθέλκουσας του άνω τοιχώματος.



Σχήμα 5.11 Συντελεστής οπισθέλκουσας του άνω κινούμενου τοιχώματος συναρτήσει του αριθμού Re .

5.4 Ανάλυση σφαλμάτων

5.4.1 Πηγές σφαλμάτων

Δεν υπάρχει αναλυτική λύση για το πρόβλημα της ροής σε κοιλότητα. Τα αποτελέσματα της εργασίας που περιγράφεται στο παρόν κεφάλαιο συγκρίνονται με τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν με τη χρήση διάφορων άλλων μεθόδων. Υπάρχουν διαφορές ανάμεσα στα αποτελέσματα προγενέστερων υπολογισμών, ειδικά σε μεγαλύτερες τιμές του αριθμού Re . Σε αρκετές από τις εργασίες αυτές δηλώνεται ότι τα δεδομένα των δευτερευουσών δινών είναι λιγότερο αξιόπιστα λόγω των γωνιακών ιδιομορφιών και / ή των σφαλμάτων στρογγυλοποίησης, των πλεγματικών

περιορισμών όσον αφορά το μέγεθός τους ή επειδή οι τιμές της ροϊκής συνάρτησης στις γωνίες είναι μικρές και, σε ορισμένες περιπτώσεις, κάτω από τα ακρίβεια σύγκλισης των υπολογισμών.

Τα αποτελέσματα που προκύπτουν στις προσομοιώσεις με τη χρήση της μεθόδου LB βρίσκονται πολύ κοντά σε αυτά των Ghia *et al* για $Re \geq 1000$. Ωστόσο, οι ιδιότητες των δευτερευουσών δινών ήταν λιγότερο ικανοποιητικές για Re μικρότερο από 1000. Η δευτερεύουσα δίνη της κάτω αριστερής γωνίας για $Re = 100$, της οποίας η ροϊκή συνάρτηση έχει μικρή τιμή της τάξεως του 10^{-6} , δεν ανιχνεύθηκε από την LBM που χρησιμοποιήθηκε στις αρχικές προσομοιώσεις. Επίσης, η δευτερεύουσα δίνη στην κάτω δεξιά γωνία για τον ίδιο αριθμό Re , της οποίας η ροϊκή συνάρτηση είναι της τάξεως του 10^{-5} , δεν είχε αντίστοιχα αποτελέσματα με αυτά άλλων ερευνητών. Παρόλο που τα προαναφερθέντα δεν αποτελούν πρωταρχικό θέμα, είναι βασικό να ερευνηθούν τα αίτια των παραπάνω ασυμφωνιών και να υπάρξουν βελτιώσεις.

Οι θεωρητικές υποθέσεις της παρούσας μεθόδου είναι η εξίσωση μεταφοράς Boltzmann και ο χρόνος χαλάρωσης (single relaxation time approximation) του όρου σύγκρουσης. Εφόσον οι μακροσκοπικές ιδιότητες του ρευστού μεταβάλλονται αρκετά αργά στο χώρο και το χρόνο συγκρινόμενες με τις μικροσκοπική σωματιδιακή δυναμική, οι συγκρούσεις θα πρέπει να διατηρούν περίπου την τοπική ισορροπία έτσι ώστε οι θεωρήσεις του μοριακού χάους του Boltzmann και του χρόνου χαλάρωσης του μοντέλου BGK να ισχύουν. Οι πιθανοί λόγοι των “σφαλμάτων” που υπεισέρχονται στις προσομοιώσεις μπορούν να κατηγοριοποιηθούν ως ακολούθως:

1. Η μικρή επίδραση της συμπίεστότητας στις προσομοιώσεις LB μπορεί να προκαλέσει διαφορές συγκρινόμενη με μοντέλα όπου η συμπίεστότητα είναι μηδέν.

2. Το πλέγμα που χρησιμοποιήθηκε μπορεί να μην είναι αρκετά πυκνό ώστε να αναλυθούν όλα τα μικρής κλίμακας φαινόμενα.

3. Το χρονικό βήμα στο οποίο η προσομοίωση τερματίζεται μπορεί να μην είναι αρκετά μεγάλο ώστε να αναπαριστά τις μόνιμες συνθήκες.

4. Οι μέθοδοι ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούνται στον υπολογισμό της ροϊκής συνάρτησης από το πεδίο ροής μπορεί να εισάγουν σφάλματα.

5. Η χρήση μεταβλητών απλής ακρίβειας στις πρώτες προσομοιώσεις συσσωρεύουν σφάλματα αποκοπής και στρογγυλοποίησης.

Για να ελέγξουμε το σφάλμα 3, αυξήσαμε τον αριθμό των επαναλήψεων αλλά δεν υπήρξε σημαντική βελτίωση στα αρχικά αποτελέσματα, ούτε στην εύρεση ασθενών δινών στις μικρότερες κλίμακες, γεγονότα που υποδηλώνουν πως το συγκεκριμένο σφάλμα είναι πολύ μικρό συγκρινόμενο με τα υπόλοιπα. Παρακάτω, ακολουθεί ανάλυση των πηγών σφάλματος.

5.4.2 Σφάλμα ολοκλήρωσης

Τα σημαντικά χαρακτηριστικά της ροής σε κοιλότητα περιγράφονται από τη ροϊκή συνάρτηση και τις ροϊκές γραμμές. Η ροϊκή συνάρτηση που χρησιμοποιήθηκε από τους Ghia *et al.* κ.α. αποτελούσε την κύρια μεταβλητή. Στο μοντέλο Lattice Boltzmann, ωστόσο, η κύρια μεταβλητή είναι η συνάρτηση κατανομής των σωματιδίων $f_{\alpha i}$. Η ταχύτητα σε κάθε θέση υπολογίζεται από τα $f_{\alpha i}$ και η ροϊκή συνάρτηση από την ολοκλήρωση των ταχυτήτων.

Η μελέτη του σφάλματος ολοκλήρωσης που έγινε σε άλλες εργασίες, βασίστηκε σε τρεις μεθόδους ολοκλήρωσης (ορθογώνια, τραπεζοειδή και Simpson) για την περίπτωση όπου $Re = 100$. Τα αποτελέσματα και από τις τρεις μεθόδους βρίσκονται πολύ κοντά αν οι ολοκληρώσεις γίνονται προς την ίδια κατεύθυνση. Διαφορετικά, παρουσιάζονται σημαντικές διαφορές όταν η ολοκλήρωση γίνεται και από τις τέσσερις διαφορετικές κατευθύνσεις, δηλαδή ολοκληρώνοντας τη x – ταχύτητα κατά μήκος της y – κατεύθυνσης από πάνω προς τα κάτω ή αντίστροφα, και ολοκληρώνοντας την y – ταχύτητα κατά μήκος της x – κατεύθυνσης από αριστερά προς τα δεξιά ή αντίστροφα. Θεωρητικά, θα πρέπει σε κάθε περίπτωση η ροϊκή συνάρτηση να λαμβάνει την ίδια τιμή.

Από αριθμητικής άποψης, η ολοκλήρωση πρέπει να ξεκινάει από τη μικρότερη κλίμακα, όσον αφορά τις αριθμητικές ποσότητες, διαφορετικά στη μικρότερη κλίμακα θα συσσωρευτεί σφάλμα στρογγυλοποίησης. Ωστόσο, στην προκειμένη περίπτωση, η ολοκλήρωση από τον πυθμένα προς τα πάνω περιέχει σημαντικό σφάλμα. Ο λόγος μπορεί να φανεί από την εξίσωση σφάλματος. Αν χρησιμοποιείται ο κανόνας του τραπεζίου στην ακόλουθη μορφή:

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx h[\frac{1}{2}f(a) + f(a+h) + \dots + \frac{1}{2}f(b)] = I_n(f),$$

όπου $h = \frac{b-a}{n}$ και n το πλήθος των υποδιαιρέσεων στο διάστημα $[a, b]$, το σφάλμα ολοκλήρωσης μπορεί να εκφραστεί ως:

$$E_n(f) = I(f) - I_n(f) = -\frac{h^2(b-a)}{12} f''(c_n),$$

όπου c_n ένα σημείο μεταξύ των a, b . Η παραπάνω σχέση μπορεί να γραφεί καλύτερα με την ασυμπτωτική εξίσωση σφάλματος:

$$E_n(f) \approx -\frac{h}{12} [f'(b) - f'(a)]$$

Ο παράγοντας $h/12$ στην προκειμένη περίπτωση είναι περίπου ίσος με 1.3×10^{-6} . Το σφάλμα, επομένως, εξαρτάται από τις παραγώγους στα ακριανά σημεία. Στην περίπτωση της ολοκλήρωσης που λαμβάνει χώρα από την κορυφή προς τον πυθμένα ή αντίστροφα, οι δύο παράγωγοι έχουν αντίθετα πρόσημα και το σφάλμα επανζάνεται. Επιπροσθέτως, η τιμή της παραγώγου στην κορυφή είναι πολύ μεγάλη. Αριθμητικοί έλεγχοι για $Re = 100$ έχουν δείξει ότι η ολοκλήρωση με τον κανόνα του τραπεζίου από την κορυφή προς τον πυθμένα δίνει ανακριβείς τιμές. Η ολοκλήρωση από τον πυθμένα προς την κορυφή αναδεικνύει άλλη μια δίνη στην άνω αριστερή γωνία, η οποία στην πραγματικότητα δεν υπάρχει για $Re = 100$ και προκαλείται από σφάλμα ολοκλήρωσης και συμπίεστότητας. Από την άλλη πλευρά, η ολοκλήρωση από αριστερά προς τα δεξιά ή αντίστροφα δίνει στις δύο ακριανές παραγώγους το ίδιο πρόσημο, συνεπώς το σφάλμα ολοκλήρωσης ελαττώνεται. Επειδή η αριστερή γωνιακή δίνη είναι μικρότερη από την αντίστοιχη δεξιά, η ολοκλήρωση που γίνεται από αριστερά προς δεξιά δίνει καλύτερα αποτελέσματα σε σχέση με την ολοκλήρωση της αντίθετης κατεύθυνσης. Το τελικό συμπέρασμα είναι πως η χρήση του κανόνα του τραπεζίου στην ολοκλήρωση της y – ταχύτητας από αριστερά προς τα δεξιά, δίνει το πιο ακριβές ολοκλήρωμα. Το σφάλμα στην περίπτωση αυτή είναι της τάξεως 10^{-9} σύμφωνα με την ασυμπτωτική εξίσωση σφάλματος.

5.4.3 Σφάλμα συμπίεστότητας

Στο Κεφάλαιο 2 είδαμε συνοπτικά πως το παρόν μοντέλο LBE αντιπροσωπεύει την εξίσωση Navier – Stokes όταν η συμπίεστότητα είναι στο όριο μηδέν. Στην προσομοίωση LB όμως, η πυκνότητα δεν μπορεί να μείνει σταθερή

(διαφορετικά οι μεταβολές της πίεσης δεν μπορούν να περιγραφούν). Είναι λοιπόν βασικό να βρεθεί η επιρροή της συμπιεστότητας στην παρούσα λύση.

Μια ποσότητα που αντιπροσωπεύει την συμπιεστότητα είναι η μέση διακύμανση της πυκνότητας. Η μέση πυκνότητα ορίζεται ως:

$$\bar{\rho} = \frac{\sum_i \rho(x_i, t)}{N}$$

όπου N ο συνολικός αριθμός των κόμβων στην περιοχή της κοιλότητας. Η μέση διακύμανση της πυκνότητας ορίζεται από τη σχέση:

$$\Delta = \frac{1}{\rho} \sqrt{\frac{\sum ((\rho - \bar{\rho})^2)}{N}}$$

Η επίδραση της συμπιεστότητας μπορεί να εξεταστεί στο πρόβλημα της ροής σε κοιλότητα και ως ακολούθως: Στις μόνιμες συνθήκες, η εξίσωση της συνέχειας που αντιπροσωπεύεται από τη μέθοδο LB είναι $\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$ λόγω της μη – σταθερής πυκνότητας ρ . Η ταχύτητα \mathbf{u} δεν ικανοποιεί τη συνθήκη ασυμπίεστης συνέχειας που δίνεται ακριβώς από τη σχέση $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. Από την εξίσωση αυτή πηγάζει το γεγονός ότι η ροϊκή συνάρτηση μπορεί να οριστεί χρησιμοποιώντας τις σχέσεις $u = \frac{\partial \psi}{\partial y}$ και

$v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}$, όπου ψ η ροϊκή συνάρτηση. Δεν υπάρχει πραγματικά ακριβής ορισμός

της ροϊκής συνάρτησης στη μέθοδο LB. Δεδομένου ενός διακριτού πεδίου ταχυτήτων που προέρχεται από τον υπολογισμό LB, προκύπτει μια προσέγγιση της ροϊκής συνάρτησης για την ασυμπίεστη ροή με $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$. Ο ορισμός της ροϊκής συνάρτησης αναφερόμενος ως $\psi = \int -v dx + u dy$ χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό της ροϊκής συνάρτησης. Όταν ολοκληρώνεται μόνο στη x- ή y- κατεύθυνση, το ολοκλήρωμα γίνεται $\psi = \int_0^y u dy$ ή $\psi = -\int_0^x v dx$. Στην περίπτωση της ασυμπίεστης ροής σε κοιλότητα, τα σύνορα συμπίπτουν με μηδενική ροϊκή συνάρτηση. Τα ολοκληρώματα παίρνουν τη μορφή:

$$\psi = \int_0^L u dy = \int_0^L v dx = 0,$$

όπου L το συνολικό μήκος του τοιχώματος. Σε ένα ασυμπίεστο μοντέλο, η ολοκλήρωση του u (ή v) κατά μήκος της y (ή x) κατεύθυνσης από το ένα άκρο της κοιλότητας δίνει μια θεωρητική τιμή στη ροϊκή συνάρτηση ίση με μηδέν στο άλλο άκρο. Στους παρόντες υπολογισμούς, ωστόσο, η ροϊκή συνάρτηση στο τοίχωμα δεν είναι ακριβώς ίση με το μηδέν εξαιτίας των σφαλμάτων στρογγυλοποίησης και ολοκλήρωσης. Λόγω των επιπρόσθετων φαινομένων συμπεστότητας στη μέθοδο LB, εάν η ροϊκή συνάρτηση υπολογίζεται ολοκληρώνοντας το v από την αριστερή προς τη δεξιά άκρη της κοιλότητας, οι τιμές της ροϊκής συνάρτησης στο δεξιό τοίχωμα δείχνουν το σφάλμα που προέκυψε από τα σφάλματα στρογγυλοποίησης, ολοκλήρωσης και συμπεστότητας. Επειδή ο κανόνας του τραπεζίου δίνει τα ίδια αποτελέσματα σε ολοκληρώματα που γίνονται από αντίθετες κατευθύνσεις εάν δεν υφίσταται σφάλμα στρογγυλοποίησης, το σφάλμα στρογγυλοποίησης βρίσκεται συγκρίνοντας τις τιμές της ροϊκής συνάρτησης στο αριστερό και δεξιό τοίχωμα λαμβανόμενες από αντίθετες κατευθύνσεις (οι άλλες πηγές σφάλματος, συμπεστότητα και ολοκλήρωση, είναι οι ίδιες για τα δυο αυτά ολοκληρώματα). Το σφάλμα αυτό είναι μικρότερο από 10^{-9} περίπου. Το σφάλμα ολοκλήρωσης είναι της τάξεως του 10^{-9} όπως προαναφέρθηκε. Επομένως, η μέγιστη και η μέση τιμή της ψ στο δεξιό τοίχωμα μπορεί να υπολογιστεί ως ένας δείκτης σφάλματος οφειλόμενου στη συμπεστότητα εάν η τιμή αυτή είναι μεγαλύτερη από 10^{-8} . Η μέση και μέγιστη τιμή της ροϊκής συνάρτησης στο δεξιό άκρο της κοιλότητας ορίζεται, αντίστοιχα, ως:

$$S_a = \sqrt{\frac{\sum (\psi^2(n_x, j))}{n_y}}$$

και:

$$S_m = \max_j |\psi(n_x, j)|$$

όπου $n_x = n_y = 256$ το πλήθος των κόμβων στη x - και y - κατεύθυνση αντίστοιχα. Τα αποτελέσματα δείχνουν πως τα S_a και S_m είναι ανάλογα του τετραγώνου του αριθμού

Mach , $M = \frac{u}{c_s}$, όπου $c_s = \frac{1}{\sqrt{3}}$ η ταχύτητα του ήχου. Το σφάλμα συμπεστότητας

υπολογιζόμενο με τον τρόπο αυτό μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως ένα ποσοτικό μέγεθος της επίδρασης της συμπεστότητας της μεθόδου LB. Η μεταβολή του σφάλματος συμπεστότητας με τον αριθμό Re υπολογίζεται για $U = 0.1$ και φαίνεται στον Πίνακα 5.4. Το σφάλμα συμπεστότητας δεν μεταβάλλεται σημαντικά με τον

αριθμό Re . Με την αύξηση του αριθμού Re , το σφάλμα ελαττώνεται λίγο, αλλά παραμένει της ίδιας τάξης μεγέθους.

Re	100	400	1000	2000	5000	7500
S_a	2.3×10^{-4}	1.0×10^{-4}	6.2×10^{-5}	4.5×10^{-5}	3.6×10^{-5}	3.7×10^{-5}
S_m	6.8×10^{-4}	3.2×10^{-4}	2.2×10^{-4}	1.45×10^{-4}	1.0×10^{-4}	8.6×10^{-5}

Πίνακας 5.4 Επίδραση συμπιεστότητας συναρτήσει του Re για $U_{out} = 0.1$

Το σφάλμα συμπιεστότητας μετρούμενο με τα S_a , S_m έχει περίπου το ίδιο μέγεθος επιρροής με τα μικρής κλίμακας φαινόμενα στη ροή σε κοιλότητα για μικρές τιμές του αριθμού Re . Το σφάλμα αυτό μπορεί να ελαττωθεί χρησιμοποιώντας μικρότερες ταχύτητες στο άνω σύνορο. Ωστόσο, ο αριθμός των χρονικών βημάτων που απαιτούνται για να επιτευχθούν μόνιμες συνθήκες για μικρότερες ταχύτητες του άνω συνόρου αυξάνει δραματικά.

5.5 Συμπεράσματα

Η λεπτομερής μελέτη του προβλήματος της ροής σε κοιλότητα χρησιμοποιώντας τη μέθοδο LB έδειξε ότι η μέθοδος είναι ακριβής συγκρινόμενη με άλλες συμβατικές μεθόδους κάνοντας χρήση πλέγματος ιδίου μεγέθους. Η επαλήθευση αυτή παρέχει εμπιστοσύνη στην εφαρμογή της συγκεκριμένης μεθόδου και σε άλλα πιο πολύπλοκα συστήματα. Όλες οι θεωρήσεις και τα συμπεράσματα της παρούσας εργασίας όπως οι συνοριακές συνθήκες, το μέγεθος του πλέγματος, η επιρροή της συμπιεστότητας και το εύρος των παραμέτρων, είναι σημαντικά κατά την εφαρμογή της μεθόδου σε άλλα προβλήματα. Προκύπτουν οι ακόλουθες παρατηρήσεις:

1. Η κατάλληλη υλοποίηση των συνοριακών συνθηκών είναι πολύ βασική για την προσομοίωση με τη μέθοδο LB. Είναι σημαντικό το γεγονός ότι οι συνοριακές συνθήκες που εφαρμόζονται στην προσομοίωση αντιπροσωπεύουν το σωστό φυσικό πρόβλημα. Για παράδειγμα, στη ροή σε κοιλότητα, πέρα από την ομοιόμορφη ταχύτητα του άνω κινούμενου τοιχώματος και τις συνθήκες μη – ολίσθησης των υπόλοιπων τοιχωμάτων, η μάζα θα πρέπει να διατηρείται σε όλη την περιοχή της

ροής. Τυχόν παραβίαση του τελευταίου περιορισμού θα παράγει αφύσικα αποτελέσματα. Γίνεται αντιληπτό ότι κάποιες ακατάλληλες συνοριακές συνθήκες μπορούν να παρέχουν μια ποιοτικά λογική ροή αλλά οδηγούν σε ποσοτικά εσφαλμένα αποτελέσματα.

2. Οι ρυθμιζόμενες παράμετροι στη μέθοδο Lattice Boltzmann και στο συγκεκριμένο πρόβλημα είναι το μέγεθος του πλέγματος, η μέγιστη ταχύτητα και ο χρόνος χαλάρωσης (τ , relaxation time). Το μέγεθος του πλέγματος θα πρέπει να επιλεγεί έτσι ώστε να επιτευχθεί επαρκής ανάλυση σε όλες τις κλίμακες του προβλήματος με ένα οικονομικά ανεκτό κόστος. Η μέγιστη ταχύτητα που χρησιμοποιείται σε μια προσομοίωση θα πρέπει να είναι επαρκώς μικρή, προκαλώντας μικρά σφάλματα συμπιεστότητας (compressibility errors), και συνεπώς με την κατανομή ισορροπίας η οποία είναι ένα ανάπτυγμα με μικρή ταχύτητα. Επειδή το μέγεθος του πλέγματος και η μέγιστη ταχύτητα είναι περιορισμένα μεγέθη, ο χρόνος χαλάρωσης θα πρέπει να είναι μικρός για να επιτευχθούν μεγαλύτεροι αριθμοί Re. Έχει βρεθεί [8] ότι ο μικρότερος χρόνος χαλάρωσης τ_{\min} που οδηγεί σε ευσταθείς προσομοιώσεις εξαρτάται από το λόγο κινούμενων και ακίνητων σωματιδίων (στο εξαγωνικό πλέγμα, διότι στο τετραγωνικό πλέγμα ο λόγος αυτός είναι σταθερός και ίσος με 4), από τη μέγιστη ταχύτητα και από το υπάρχον πρόβλημα. Για να επιτευχθεί μια αξιόπιστη προσομοίωση, η τιμή του χρόνου χαλάρωσης δεν θα πρέπει να επιλεγεί πολύ κοντά στην κατώτατη τιμή του εξεταζόμενου προβλήματος. Η τιμή αυτή δεν μπορεί να είναι μικρότερη από $\frac{1}{2}$ για να εξασφαλίζει αποδεκτή ρευστότητα σε κάθε περίπτωση. Από την άλλη μεριά, επειδή η ταχύτητα του ήχου στη μέθοδο LB είναι τάξεως ένα $\{O(1)\}$, ο χρόνος χαλάρωσης (τ) αντιπροσωπεύει τον χαρακτηριστικό χρόνο σύγκρουσης. Για το λόγο αυτό, το (τ) είναι της ίδιας τάξης με τη μέση ελεύθερη διαδρομή (μετρημένη σε μονάδες πλέγματος {lattice units}). Επομένως, το (τ) δεν θα πρέπει να είναι πολύ μεγάλο για να εξασφαλίζει ότι η μέση ελεύθερη διαδρομή είναι πολύ μικρότερη από το φυσικό χαρακτηριστικό μήκος της κλίμακας. Αυτή είναι μια απαραίτητη συνθήκη της μικροσκοπικής στατιστικής της μεθόδου LB ώστε να προσεγγίσει τις εξισώσεις Navier – Stokes.

3. Το φαινόμενο της συμπιεστότητας μπορεί να αποτελέσει σημαντικό παράγοντα όταν φυσικές ποσότητες της ελάχιστης κλίμακας σε μια ασυμπίεστη ροή είναι συγκρίσιμες με το σφάλμα συμπιεστότητας. Η χρήση μιας μικρότερης τιμής της

μέγιστης ταχύτητας μπορεί να ελαττώσει το σφάλμα αυτό. Ωστόσο, δεν είναι χρήσιμο να προλέγουμε κλίμακες της τάξεως του 10^{-8} ή μικρότερες στην παρούσα μέθοδο LB.

4. Το τετραγωνικό πλέγμα είναι καλύτερο από το τριγωνικό πλέγμα (FHP) στις διδιάστατες προσομοιώσεις επειδή το πρώτο μπορεί να φτάσει υψηλότερες τιμές του αριθμού Re για δεδομένο μέγεθος πλέγματος και μέγιστη ταχύτητα.

5. Στην παρούσα φάση, η μέθοδος Lattice Boltzmann δεν είναι οικονομική συγκρινόμενη με τις συμβατικές μεθόδους. Ωστόσο, δεν υπάρχει καμία αμφιβολία ότι η μέθοδος LB μπορεί να προσομοιώνει και άλλα πολύπλοκα προβλήματα σε έναν παράλληλο H/Y.

6. Υπάρχει κάποια κυμάτωση στις ροϊκές γραμμές και τις ισοϋψείς της πίεσης σε υψηλούς αριθμούς Re. Σε άλλες εργασίες έγιναν προσπάθειες να εξαλειφθούν οι κυματισμοί αυτοί κάνοντας χρήση υποπλεγματικού μοντέλου (subgrid modelling) χωρίς όμως καμία επιτυχία. Οι κυματισμοί εμφανίζονται κυρίως στις δύο άνω γωνίες όπου η ιδιομορφία τους προκαλεί μεγάλη κλίση (gradients) στη στροβιλικότητα και την πίεση. Οι κυματισμοί εμφανίζονται επίσης και στην κάτω δεξιά γωνία της τριτογενούς δίνης στο σχήμα που εικονίζονται οι ροϊκές γραμμές για $Re = 7500$. Εξετάζοντας προσεχτικά το σχήμα, βλέπουμε πως οι κυματώσεις ευθυγραμμίζονται με τις κατευθύνσεις του πλέγματος. Γι' αυτό το λόγο μπορούμε να υποθέσουμε πως η επίδραση του πλέγματος που οφείλεται στη διακριτοποίηση της ταχύτητας αποτελεί τη βασική αιτία των κυματισμών. Παραμένει ακόμη ένα ανοιχτό ερώτημα ο τρόπος με τον οποίο θα ελαττωθεί η ταλάντωση της λύσης σε υψηλές τιμές του αριθμού Re.

Να σημειώσουμε ακόμη πως έχει αναπτυχθεί ένα βελτιωμένο μοντέλο LB για ασυμπίεστη ισόθερμη ροή (Improved Incompressible Lattice Boltzmann Model, d2q9i) [3 – §5], το οποίο είναι πιο ευσταθές και ελαττώνει σημαντικά το σφάλμα συμπίεστότητας.

Κεφάλαιο 6.

Η Μέθοδος Lattice Boltzmann σε τρεις διαστάσεις

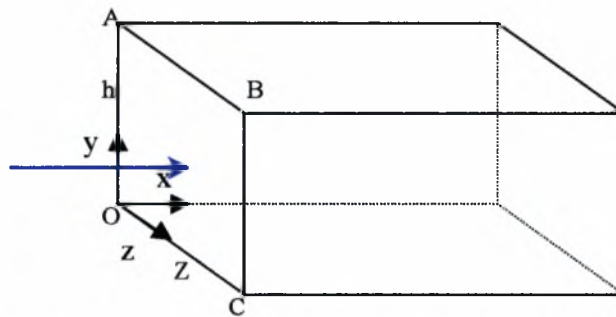
6.1 Εισαγωγή

Στα προηγούμενα κεφάλαια είδαμε εφαρμογές της μεθόδου LB σε διδιάστατα προβλήματα. Στο παρόν κεφάλαιο επεκτείνουμε τις εφαρμογές μας στις τρεις διαστάσεις και μελετάμε τη συμπεριφορά και την αξιοπιστία της μεθόδου μέσα από το πρόβλημα της ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής (rectangular duct flow). Το πρόβλημα αυτό διαθέτει αναλυτική λύση, η οποία μας βοηθάει να γνωρίζουμε με ακρίβεια το σφάλμα προσέγγισής της από την αριθμητική λύση. Για την αριθμητική επίλυση, χρησιμοποιείται το τρισδιάστατο πλέγμα 15 κατευθύνσεων (d3q15). Η υλοποίηση των συνοριακών συνθηκών σε επίπεδο τοίχωμα εφαρμόζοντας τη συνθήκη αναπήδησης (bounce back) περιγράφεται αναλυτικά.

Από την εφαρμογή αυτή μπορούν να προκύψουν συμπεράσματα για όλες τις παραμέτρους που υπεισέρχονται στο πρόβλημα όπως οι διαστάσεις της διατομής, η πυκνότητα του πλέγματος, ο χρόνος χαλάρωσης (relaxation time), η μέγιστη ταχύτητα στον άξονα συμμετρίας της ροής, ο αριθμός Mach και ο αριθμός Knudsen. Τα συμπεράσματα αυτά μπορούν να γενικευθούν και να χρησιμεύσουν σε περαιτέρω δυσκολότερες εφαρμογές όπως η τρισδιάστατη ροή σε κυβική κοιλότητα (3D Driven Cavity Flow). Στο σημείο αυτό να σημειώσουμε πως ο κώδικας επίλυσης της ροής σε κυβική κοιλότητα έχει υλοποιηθεί στο εργαστήριο και αναμένονται αποτελέσματα.

6.2 Αναλυτική λύση της ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής

Θεωρούμε έναν αγωγό ορθογωνικής διατομής, όπως εικονίζεται στο Σχ. 6.1 .



Σχήμα 6.1 Γεωμετρία ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής.

Η εξίσωσης που περιγράφουν το πρόβλημα της πλήρως ανεπτυγμένης ροής είναι οι εξής:

Εξίσωση συνέχειας:
$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (6.1)$$

Εξισώσεις ορμής:
$$-\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) = 0, \quad -\frac{\partial p}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial z} = 0 \quad (6.2)$$

ή απλούστερα:
$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dx} = \text{const.} \quad (\text{εξίσωση Poisson}) \quad (6.3)$$

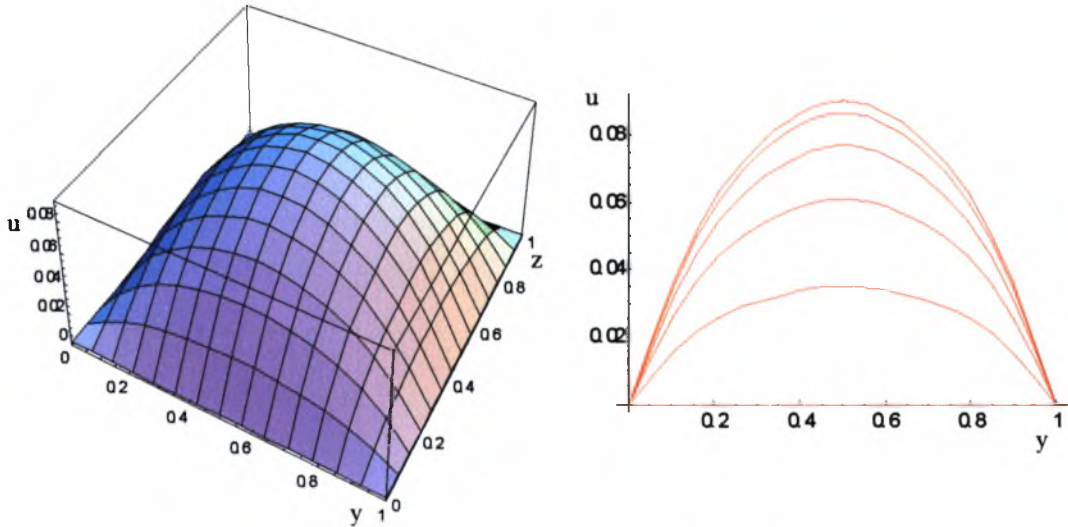
όπου μ το δυναμικό ιξώδες ($\mu = \rho \nu$) και p η πίεση, η οποία είναι συνάρτηση μόνο του x στη συγκεκριμένη πλήρως ανεπτυγμένη ροή. Η κλίση της πίεσης $\frac{dp}{dx}$ πρέπει να είναι μια θετική σταθερά. Η ταχύτητα u είναι συνάρτηση των y και z , δηλαδή $u = u(y, z)$, και σε κάθε συνοριακή επιφάνεια ισχύει $u_w = 0$ από τη συνθήκη μη - ολίσθησης.

Αν θεωρήσουμε ότι το ύψος της διατομής ABCO είναι $h = l_1$ και το πλάτος $Z = l_2$ ($0 \leq y \leq l_1$ και $0 \leq z \leq l_2$), οι εκφράσεις που μας δίνουν την αναλυτική λύση είναι οι ακόλουθες:

$$u(y, z) = - \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{A_{mn}}{\pi^2 \left(\frac{m^2}{l_1^2} + \frac{n^2}{l_2^2} \right)} \sin \frac{m\pi y}{l_1} \sin \frac{n\pi z}{l_2} \quad (6.4)$$

$$\text{όπου: } A_{mn} = \frac{4}{l_1 l_2} \int_0^{l_1} \int_0^{l_2} \frac{1}{\mu} \frac{dp}{dx} \sin \frac{m\pi y}{l_1} \sin \frac{n\pi z}{l_2} dz dy \quad (6.5)$$

Θεωρώντας $l_1 = l_2 = 1$, $\mu = 0.03086$ και $\frac{dp}{dx} = 0.03743$, η μέγιστη ταχύτητα στον άξονα της ροής προκύπτει $u_{\max} = 0.09$ και η απεικόνιση της ροής εικονίζεται στο παρακάτω σχήμα.



Σχήμα 6.2 Απεικόνιση της αναλυτικής λύσης της ροής σε τετραγωνική διατομή.

6.3 Αριθμητική λύση της ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής

6.3.1 Διατύπωση του προβλήματος – Υλοποίηση Συνοριακών Συνθηκών

Το Σχήμα 6.1 απεικονίζει τη γεωμετρία του προβλήματος, την κατεύθυνση της ροής, την αρχή των αξόνων και τις κατευθύνσεις τους. Το πλέγμα που επιλέγουμε είναι το κυβικό 15 κατευθύνσεων, το οποίο απεικονίζεται στο Σχήμα 2.4 (σελ.28). Υπενθυμίζουμε πως υπάρχουν δύο τύποι κινούμενων σωματιδίων: τα σωματίδια (I) που κινούνται κατά μήκος των αξόνων με ταχύτητα $|\mathbf{e}_1| = 1$ και τα σωματίδια (II) που κινούνται κατά μήκος των διαγώνιων κατευθύνσεων με ταχύτητα $|\mathbf{e}_2| = \sqrt{3}$. Επίσης, κάθε κόμβος διαθέτει σωματίδια σε ηρεμία με μηδενική ταχύτητα $\mathbf{e}_0 = 0$. Τα διανύσματα κατευθύνσεως των ταχυτήτων είναι τα ακόλουθα:

$$\mathbf{e}_0 = (0, 0, 0)$$

$$\mathbf{e}_1 = (1, 0, 0), \mathbf{e}_2 = (0, 0, -1), \mathbf{e}_3 = (-1, 0, 0), \mathbf{e}_4 = (0, 0, 1), \mathbf{e}_5 = (0, 1, 0), \mathbf{e}_6 = (0, -1, 0)$$

$$\mathbf{e}_7 = (1, 1, 1), \mathbf{e}_8 = (1, 1, -1), \mathbf{e}_9 = (-1, 1, -1), \mathbf{e}_{10} = (-1, 1, 1), \mathbf{e}_{11} = (1, -1, 1),$$

$$\mathbf{e}_{12} = (1, -1, -1), \mathbf{e}_{13} = (-1, -1, -1), \mathbf{e}_{14} = (-1, -1, 1)$$

Οι σχέσεις που ισχύουν για τα f^{eq} είναι οι ακόλουθες:

$$f_0^{eq} = \frac{2}{9} \rho \left[1 - \frac{3}{2} u^2 \right]$$

$$f_{1i}^{eq} = \frac{1}{9} \rho \left[1 + 3(\mathbf{e}_{1i} \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_{1i} \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} u^2 \right]$$

$$f_{2i}^{eq} = \frac{1}{72} \rho \left[1 + 3(\mathbf{e}_{2i} \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2} (\mathbf{e}_{2i} \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} u^2 \right]$$

Η σχέση που συνδέει το κινηματικό ιξώδες ν με τον χρόνο χαλάρωσης είναι η ίδια που ισχύει και στο διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα 9 ταχυτήτων:

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \delta$$

Η ταχύτητα του ήχου δίνεται από τη σχέση:

$$c_s = \sqrt{\frac{3}{8}}$$

Η συγκεκριμένη ροή, όπως και η ροή Poiseuille που μελετήσαμε σε προηγούμενα κεφάλαια, προκαλείται από την επίδραση σωματικής δύναμης $\rho g_x = G, g_y = 0, g_z = 0$ ($G = -\frac{dp}{dx}$). Η LBGK, η οποία ενσωματώνει τη σωματική δύναμη, είναι μια τροποποίηση της Εξ. (3.1) και δίνεται από τη σχέση:

$$f_i(\mathbf{x} + \delta \mathbf{e}_i, t + \delta) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau} [f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(0)}(\mathbf{x}, t)] + \delta h_i \quad i = 0, 1, \dots, 14 \quad (3.10)$$

όπου οι συντελεστές h_i επιλέγονται ως:

$$\begin{aligned} h_i &= 0, \quad i = 0, 2, 4, 5, 6 & h_i &= \frac{1}{16} G, \quad i = 7, 8, 11, 12 \\ h_i &= -\frac{1}{16} G, \quad i = 9, 10, 13, 14 & h_1 &= -h_3 = \frac{1}{4} G \end{aligned} \quad (6.6)$$

έτσι ώστε να ικανοποιείται το ακόλουθο σύστημα εξισώσεων:

$$\sum_{i=0}^{14} h_i = 0 \quad (6.7)$$

$$\sum_{i=0}^{14} h_i \mathbf{e}_i = \rho \mathbf{g} \quad (6.8)$$

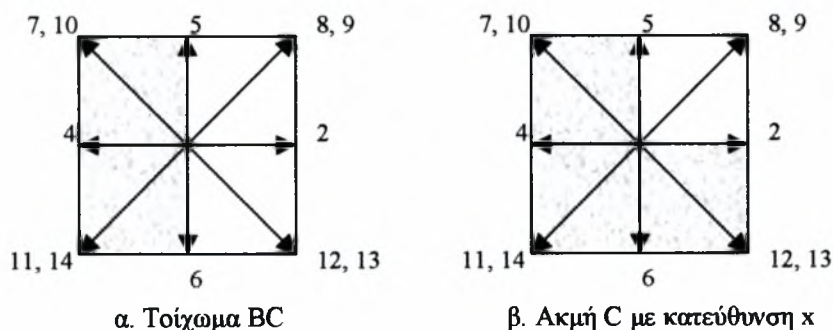
$$\sum_{i=0}^{14} h_i \mathbf{e}_{ia} \mathbf{e}_{ib} = 0 \quad (6.9)$$

$$h_i = 0, i = 0, 2, 4, 5, 6 \quad (6.10)$$

Τα δεδομένα του προβλήματος που εισάγουμε είναι το πλήθος των κόμβων ανά κατεύθυνση, τον χρόνο χαλάρωσης, την πυκνότητα του ρευστού και την κλίση της πίεσης.

Πριν προχωρήσουμε στα αριθμητικά αποτελέσματα, θα αναφερθούμε με συντομία στην υλοποίηση των συνοριακών συνθηκών του προβλήματος εφαρμόζοντας τη συνθήκη αναπήδησης (bounce back) σε σταθερό αδιαπέραστο τοίχωμα [50]. Οι συνοριακές συνθήκες στο συγκεκριμένο πρόβλημα διαχωρίζονται σε δύο κατηγορίες: σ. σ. επιφάνειας και σ. σ. ακμής (τομή δύο κάθετων επιπέδων), όπου η κάθε μια παράγει ένα πλήθος άγνωστων f_i . Συγκεκριμένα, η πρώτη παράγει 5 αγνώστους σε κάθε επιφανειακό κόμβο και η δεύτερη παράγει 8 αγνώστους σε κάθε κόμβο που βρίσκεται πάνω σε ακμή. Επίσης, να σημειώσουμε πως σε κάθε γωνιακό κόμβο, που είναι το σημείο τομής τριών κάθετων ανά δύο επιπέδων, παράγονται 10 αγνώστοι (3D Cavity Flow).

Ας θεωρήσουμε έναν κόμβο που βρίσκεται πάνω στο τοίχωμα BC. Στο Σχήμα 6.3α απεικονίζεται ο κόμβος με τις κατευθύνσεις προς και από τη ροή. Οι άγνωστες ποσότητες είναι τα f_i με $i = 2, 8, 9, 12, 13$ δηλαδή οι κατευθύνσεις που έχουν φορά προς τη ροή.



Σχήμα 6.3 Συνοριακοί κόμβοι σε τοίχωμα και ακμή αντίστοιχα.

Αρχικά εφαρμόζουμε τη συνθήκη αναπήδησης στις άγνωστες κατευθύνσεις:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{e}_i, t) = f(\mathbf{x}, -\mathbf{e}_i, t), i = 2, 8, 9, 12, 13 \quad (6.11)$$

Κατόπιν, η μάζα ανακατανέμεται στους κόμβους που έχουν συνιστώσα ταχύτητας εφαπτόμενη στην επιφάνεια, σύμφωνα με τη σχέση:

$$f_i = f_i - \frac{1}{4} \rho \mathbf{v} \mathbf{e}_i \quad i = 8, 9, 12, 13 \quad (6.12)$$

όπου $\mathbf{v} = \rho \mathbf{u}$. Η πυκνότητα ορμής υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\rho \mathbf{u}(x, t) = \sum_{i=1}^{14} f_i \mathbf{e}_i \quad (6.13)$$

Ας θεωρήσουμε τώρα έναν κόμβο που βρίσκεται πάνω στην ακμή C κατά την κατεύθυνση του x - άξονα. Στο Σχήμα 6.3β απεικονίζεται ο κόμβος με τις κατευθύνσεις προς και από τη ροή. Οι άγνωστες ποσότητες είναι τα f_i με $i = 2, 5, 7, 8, 9, 10, 12, 13$. Για τις κατευθύνσεις 2, 5, 8, 9 εφαρμόζουμε τη Σχέση (6.11). Οι υπόλοιπες άγνωστες κατευθύνσεις υπολογίζονται σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση:

$$f(\mathbf{x}, \mathbf{e}_i, t) = f(\mathbf{x}, -\mathbf{e}_i, t) = \frac{1}{2} (f^+(\mathbf{x}, \mathbf{e}_i, t-1) + f^+(\mathbf{x}, -\mathbf{e}_i, t-1)) \quad (6.14)$$

$$\text{όπου } f_i^+(\mathbf{x}, t) = f_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{\tau} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{eq}(\mathbf{x}, t)) \quad (6.15)$$

Έπειτα, η πυκνότητα ορμής υπολογίζεται από τη Σχέση (6.13) και τέλος η μάζα ανακατανέμεται στις διαγώνιες κατευθύνσεις που έχουν φορά προς τη ροή σύμφωνα με τη Σχέση (6.12) για $i = 8, 9$.

Στην περίπτωση που έχουμε κινούμενο τοίχωμα, εργαζόμαστε όπως στους επιφανειακούς κόμβους με $\mathbf{v} = \rho (\mathbf{u} - \mathbf{u}_w)$ όπου \mathbf{u}_w η ταχύτητα του τοιχώματος.

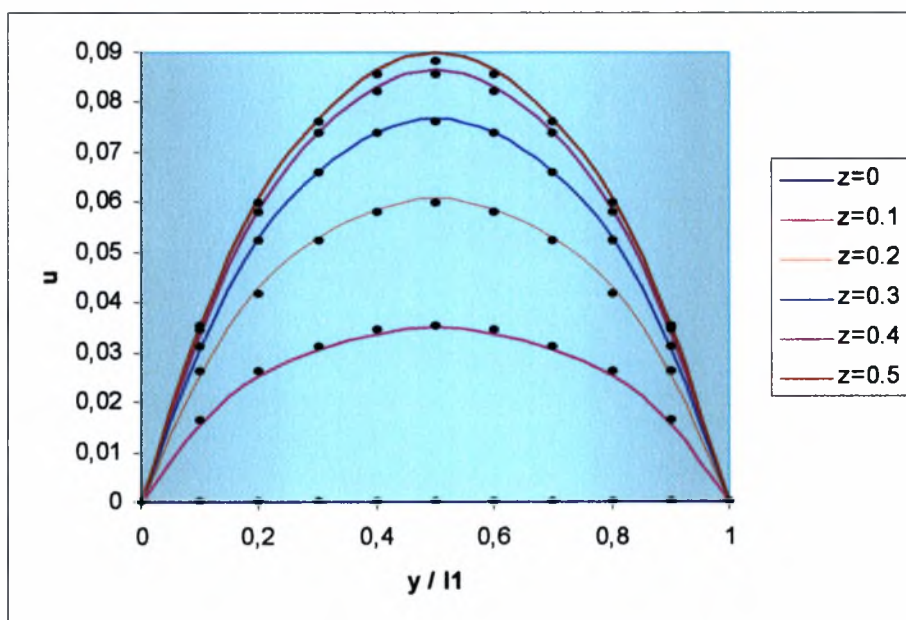
6.3.2 Αριθμητικά αποτελέσματα – Συμπεράσματα

Η ροή σε αγωγό ορθογωνικής διατομής δεν μπορεί να αναπαραχθεί ακριβώς με τη μέθοδο LB εξαιτίας των σφαλμάτων που σχετίζονται με τη διακριτοποίηση, τον αριθμό Mach και τον αριθμό Knudsen [51]. Ο αριθμός Knudsen ορίζεται από τη σχέση:

$$\varepsilon = \frac{2\tau - 1}{Z} \quad (6.16)$$

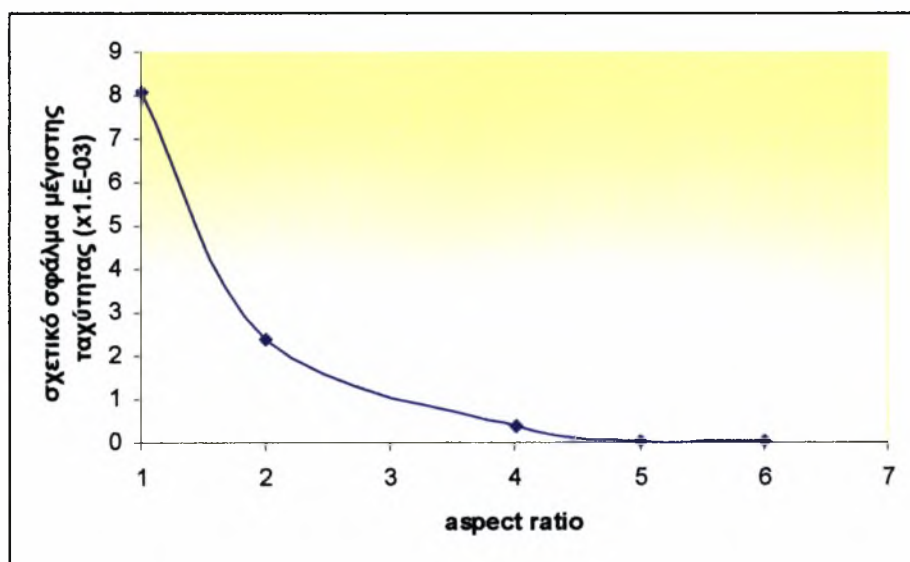
όπου τ ο χρόνος χαλάρωσης και Z το πλάτος της διατομής. Ο αριθμός Knudsen δηλαδή είναι ο λόγος της μέσης ελεύθερης διαδρομής των σωματιδίων προς την απόσταση της μακροσκοπικής κλίμακας. Επιπλέον, η ακρίβεια της αριθμητικής λύσης εξαρτάται και από τον λόγο πλάτους προς ύψος της διατομής (aspect ratio = $\frac{Z}{h}$, για συντομία as). Όταν ο λόγος αυτός πάρει τιμή 1 (περίπτωση τετραγωνικής διατομής), το σχετικό σφάλμα όσον αφορά τη μέγιστη ταχύτητα στον

άξονα συμμετρίας της ροής είναι μέγιστο. Αυξάνοντας το λόγο, το σφάλμα ελαττώνεται καθώς το πρόβλημα προσεγγίζει τη ροή Poiseuille. Το μέγιστο σχετικό σφάλμα λαμβάνει χώρα στο κέντρο της τετραγωνικής διατομής και μετακινείται προς το τοίχωμα καθώς ο λόγος αυξάνει. Στο Σχήμα 6.4 απεικονίζεται η αναλυτική λύση (συνεχείς καμπύλες) και τα αριθμητικά αποτελέσματα (σημεία) στο πρόβλημα της τετραγωνικής διατομής ($as = 1$) με $\tau = 0.75$, $\rho = 10$, $G = 0.10107$. Το απόλυτο σφάλμα $|u - u_{\text{previous}}|$ ήταν $1.8 \cdot 10^{-12}$ για την ταχύτητα στο κέντρο, ενώ σε όλο το πεδίο ροής είχαμε μέγιστο απόλυτο σφάλμα $3.21 \cdot 10^{-9}$. Το πλέγμα που χρησιμοποιήσαμε ήταν 11×11 .



Σχήμα 6.4 Αναλυτική και αριθμητική λύση στη ροή σε αγωγό τετραγωνικής διατομής. (Τα σημεία αντιστοιχούν στα αριθμητικά αποτελέσματα)

Στο Σχήμα 6.5 απεικονίζεται το σχετικό σφάλμα στην μέγιστη ταχύτητα συναρτήσει του λόγου as . Παρατηρούμε πως στην τιμή 1, το σφάλμα είναι μέγιστο και για τιμές μεγαλύτερες του 5 σχεδόν μηδενίζεται.



Σχήμα 6.5 Σχετικό σφάλμα μέγιστης ταχύτητας συναρτήσει του λόγου as .

Το όριο ευστάθειας του αλγόριθμου εμφανίζεται να είναι για $\tau > 0.58$. Επίσης, στα αριθμητικά αποτελέσματα εμφανίζονται περιοχές όπου οι ταχύτητες u_y και u_z παίρνουν τιμές μη μηδενικές, της τάξεως 10^{-5} - 10^{-6} και αρκετές έχουν αρνητικό πρόσημο. Στις περισσότερες προσομοιώσεις είχαμε $u_{\max} \cong 0.09$.

Περαιτέρω μελέτη στο συγκεκριμένο πρόβλημα θα βοηθήσει να βρεθούν ακριβέστερα όρια στα οποία ο αλγόριθμος λειτουργεί σωστά, αλλά και πως οι αριθμοί Mach και Knudsen επηρεάζουν την ακρίβεια της αριθμητικής λύσης.

Κεφάλαιο 7.

Βασικά Συμπεράσματα – Προτάσεις

Από την παρούσα εργασία είναι φανερό πως η LBM αποτελεί μια αξιόπιστη μέθοδο ικανή για την επίλυση πιο πολύπλοκων προβλημάτων και παρουσιάζει αρκετά πλεονεκτήματα συγκριτικά με τις συμβατικές μεθόδους. Τα βασικότερα συμπεράσματα που μπορούμε να συνοψίσουμε είναι τα ακόλουθα:

- Η μέθοδος LB είναι 2^{ης} τάξεως ακρίβειας και ο αλγόριθμος επίλυσης προβλημάτων προσομοίωσης είναι σχετικά απλός. Η μέθοδος αυτή μπορεί σχετικά εύκολα να χειρίζεται τις συνοριακές συνθήκες και ενώ η υλοποίησή τους στην παρούσα εργασία (όσον αφορά τις σ. σ. σε τοίχωμα, εφαρμόζοντας τη συνθήκη αναπήδησης) παρείχε 1^{ης} τάξεως ακρίβεια, υπάρχουν μοντέλα σ. σ. που παρέχουν ακρίβεια 2^{ης} τάξεως (πχ. περιοδικές σ. σ.)
- Οι βασικότερες ρυθμιζόμενες παράμετροι στην LBM είναι το μέγεθος του πλέγματος και ο χρόνος χαλάρωσης τ . Το μέγεθος του πλέγματος θα πρέπει να επιλέγεται έτσι ώστε να επιτυγχάνεται επαρκής ανάλυση σε όλες τις κλίμακες του προβλήματος με ένα οικονομικά ανεκτό κόστος. Ο χρόνος χαλάρωσης τ δεν μπορεί να πάρει τιμές μικρότερες του $\frac{1}{2}$ για να εξασφαλίζει αποδεκτή ρευστότητα και το κινηματικό ιξώδες να είναι θετικό. Επίσης, το τ δεν πρέπει να είναι και πολύ μεγάλο για να εξασφαλίζει ότι η μέση ελεύθερη διαδρομή είναι πολύ μικρότερη από το φυσικό χαρακτηριστικό μήκος της κλίμακας. Μια συνηθισμένη περιοχή που καλύπτει τα πραγματικά ρευστά είναι $(\frac{1}{2}, 1]$. Όσο πιο κοντά βρίσκεται το τ στο 0.5 (μικρό κινηματικό ιξώδες), τόσο πιο ραγδαία αυξάνει το πλήθος των επαναλήψεων (άρα και ο υπολογιστικός χρόνος) μέχρι τελικής λύσης (κατάσταση μόνιμων συνθηκών). Η πυκνότητα δεν φαίνεται να επηρεάζει την ταχύτητα σύγκλισης στις παρούσες εφαρμογές.

- Πέρα από τη σωστή υλοποίηση των συνοριακών συνθηκών, θα πρέπει να ελέγχεται και η διατήρηση της μάζας σε όλη την περιοχή της ροής του προβλήματος. Διαφορετικά, τυχόν σφάλμα στη διατήρηση της μάζας ή στις συνοριακές συνθήκες μπορεί να οδηγήσει σε μια ποιοτικά αποδεκτή ροή αλλά σε ποσοτικά εσφαλμένα αποτελέσματα.
- Ιδιαίτερη προσοχή χρειάζεται στον κανόνα ολοκλήρωσης που επιλέγεται και στη κατεύθυνση στην οποία ολοκληρώνουμε, έτσι ώστε το σφάλμα που εισάγεται να είναι όσο το δυνατόν μικρότερο. Επίσης, η χρήση μεταβλητών διπλής ακρίβειας ελαττώνει τη συσσώρευση σφαλμάτων αποκοπής και στρογγυλοποίησης.
- Η μικρή επίδραση της συμπίεστικότητας στις προσομοιώσεις LB μπορεί να προκαλέσει διαφορές συγκρινόμενη με μοντέλα στα οποία η συμπίεστικότητα είναι μηδέν.
- Σε διδιάστατες προσομοιώσεις με επίπεδα σύνορα, το τετραγωνικό πλέγμα είναι καλύτερο από το τριγωνικό διότι τα επίπεδα σύνορα προσαρμόζονται καλύτερα στο πρώτο. Από την αριθμητική λύση των ροών Poiseuille και Couette με τη χρήση και των δύο πλεγμάτων, δεν παρουσιάστηκαν αξιοσημείωτες διαφορές, οι οποίες όμως γίνονται εμφανείς σε πιο πολύπλοκα προβλήματα (πχ 2D ροή σε κοιλότητα, [8]).
- Σε τρισδιάστατες προσομοιώσεις, οι παράμετροι που επηρεάζουν την ακρίβεια της μεθόδου είναι περισσότεροι και ορισμένα προβλήματα, όπως η ροή σε αγωγό ορθογωνικής διατομής, δεν μπορούν να επιλυθούν ακριβώς εξαιτίας σφαλμάτων που σχετίζονται με τη διακριτοποίηση και τους αριθμούς Mach και Knudsen.
- Στην παρούσα φάση, η μέθοδος LB δεν είναι οικονομική συγκριτικά με τις συμβατικές μεθόδους. Ωστόσο, δεν υπάρχει καμία αμφιβολία ότι μπορεί να προσομοιώνει πολύπλοκα προβλήματα σε έναν παράλληλο H/Y, ελατώνοντας σημαντικά τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο.

Ως συνέχεια της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας, γίνονται οι ακόλουθες προτάσεις:

- Επίλυση του προβλήματος της διδιάστατης ροής σε ορθογωνική κοιλότητα εφαρμόζοντας το βελτιωμένο μοντέλο BGK (Improved Incompressible Lattice

Boltzmann Model), αλλά και το LB Subgrid Model για μεγάλες τιμές του αριθμού Re.

- Εφαρμογή του μοντέλου BGK σε κλασσικά προβλήματα ροών με πιο πολύπλοκη γεωμετρία χρησιμοποιώντας τα προαναφερθέντα πλέγματα, αλλά και πλέγματα που κάνουν χρήση πολικών, κυλινδρικών και καμπυλόγραμμων συντεταγμένων (πχ. ροή γύρω από κύλινδρο, ροή τύπου υμένα κλπ).
- Εφαρμογή του τρισδιάστατου μοντέλου BGK 15 κατευθύνσεων στο πρόβλημα της ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής και στη ροή σε κυβική κοιλότητα, παραλληλοποιώντας τον κώδικα.
- Εφαρμογή πιο πολύπλοκων μοντέλων σε σύνθετα προβλήματα όπως τύρβη, πολυφασικές ροές με σωματίδια, προβλήματα μεταφοράς θερμότητας και ροές με χημικές αντιδράσεις.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ – ΑΝΑΦΟΡΕΣ

- [1] S. Chen and G. D. Doolen, "Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows," *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30**:329 – 364 (1998)
- [2] S. Succi, R. Benzi, and F. Higuera, "The Lattice Boltzmann Equation: A new tool for Computational Fluid – Dynamics," *Physica D* **47**:219 – 230 (1991)
- [3] Shuling Hou, "Lattice Boltzmann Method for Incompressible, Viscous Flow," Ph.D Thesis, Dept. of Mechanical Eng., Kansas State University (1995)
- [4] J. D. Sterling and S. Chen, "Stability Analysis of Lattice Boltzmann Methods," *Journal of Computational Physics* **123**:196 – 206 (1996)
- [5] Q. Zou, S. Hou, S. Chen, and G. Doolen, "An Improved Incompressible Lattice Boltzmann Model for Time – Independent Flows," *Journal of Statistical Physics* **81**, 35 (1995)
- [6] Q. Zou, S. Hou, and G. D. Doolen, "Analytical solutions of the lattice Boltzmann BGK model," *J. Stat. Phys.* **81**, 319 (1995)
- [7] X. He, Q. Zou, L. S. Luo, and M. Dembo, "Analytic solutions of simple flows and non-slip boundary condition for the lattice Boltzmann BGK model," *J. Stat. Phys.* **87**, 115 (1997)
- [8] S. Hou, Q. Zou, S. Chen, G. Doolen, and A. C. Cogley, "Simulation of Cavity Flow by the Lattice Boltzmann Method," *J. Comp. Phys.* **118**: 329 – 347 (1995)
- [9] D. R. Noble, J. G. Georgiadis, and R. O. Buckius, "Direct assessment of Lattice Boltzmann Hydrodynamics and Boundary Conditions for Recirculating Flows," *J. Stat. Phys.* **81**:17 – 33 (1995)
- [10] P. A. Skordos, "Initial and boundary conditions for the lattice Boltzmann method," *Phys. Rev. E* **48**, 4823 (1993).
- [11] Donald P. Ziegler, "Boundary Conditions for Lattice Boltzmann Simulations," *J. Stat. Phys.* **71**:1171 – 1177 (1993)
- [12] Q. Zou and X. He, "On pressure and velocity boundary conditions for the lattice Boltzmann BGK model," *Phys. Fluids* **9**:1591 – 1598 (1997)
- [13] T. Inamuro, M. Yoshino, and F. Ogino, "Accuracy of the lattice Boltzmann method for small Knudsen number with finite Reynolds number," *Phys. Fluids* **9**, No.11 3535 – 3542 (1997)
- [14] D. R. Noble, S. Chen, J. G. Georgiadis, R. O. Buckius, "A consistent hydrodynamic boundary condition for the lattice Boltzmann method," *Phys. Fluids* **7** (1) 203 – 209 (1995)

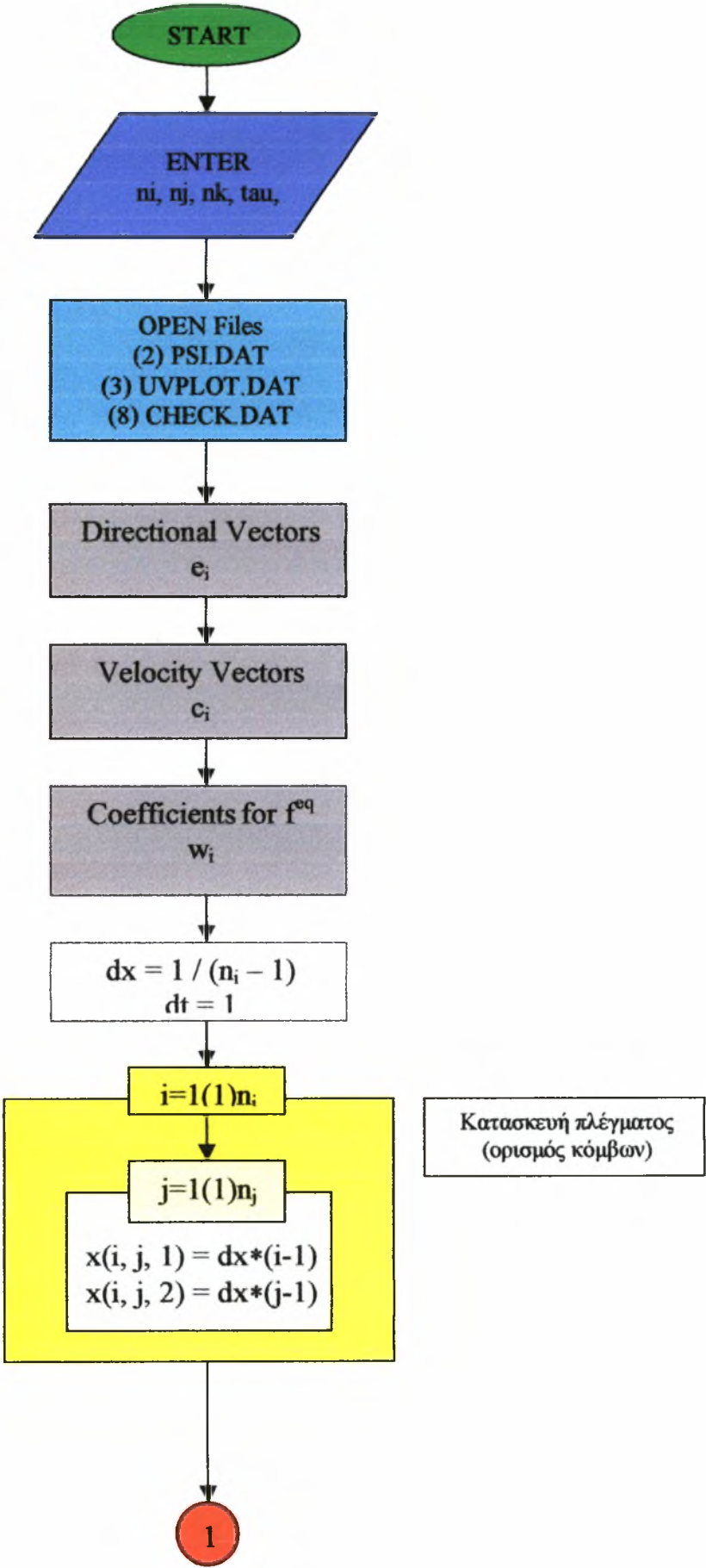
- [15] Άγγελου Θ. Παπαϊωάννου, «Μηχανική των Ρευστών», Τόμοι I & II, Αθήνα 1993
- [16] Γ. Δ. Ακρίβης, Β. Α. Δούγαλης, “Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση”, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 1998
- [17] G. E. Forsythe, M. A. Malcolm, C. B. Moler, “Αριθμητικές μέθοδοι και προγράμματα για μαθηματικούς υπολογισμούς”, (Μετάφρ.: Γ. Δ. Ακρίβης, Β. Α. Δούγαλης), Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 1998
- [18] Κωνσταντίνου Ε. Λάζου, “Fortran 77, Με Στοιχεία του MS – DOS”, Θεσσαλονίκη, 1995
- [19] K. Dowd, and Ch. R. Severance, “High Performance Computing,” 2nd Edition, O’Reilly, USA, 1998
- [20] G. B. Thomas, and R. L. Finney, “Απειροστικός Λογισμός”, (Μετάφρ.: Κ. Τσίγκανος) Τόμοι I & II, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 1997
- [21] “Lattice Gas Methods: Theory, Applications and Hardware” edited by G. D. Doolen (Physica D, 47, 1991)
- [22] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross and M. Krook, *Phys. Rev.* **94**, 511 (1954).
- [23] Higuera FJ, Jiménez J. 1989. ‘Boltzmann approach to lattice gas simulations.’ *Europhys. Lett.* **9**:663-68
- [24] Chen H, Chen S, Matthaeus WH. 1992. ‘Recovery of the Navier – Stokes equations using a lattice – gas Boltzmann method.’ *Phys. Rev. A.* **45**:R5339 – 42
- [25] Qian YH, d’Humières D, Lallemand P. 1992. ‘Lattice BGK models for Navier – Stokes equation.’ *Europhys. Lett.* **17**:479 – 84
- [26] He X, Doolen GD. 1997. ‘Lattice Boltzmann method on curvilinear coordinates system: vortex shedding behind a circular cylinder.’ *Phys. Rev. E.*
- [27] Higuera FJ, Succi S. 1989. ‘Simulating the flow around a circular cylinder with a lattice Boltzmann equation.’ *Europhys. Lett.* **8**:517 – 21
- [28] R. Cornubert, D. d’Humières, and D. Levermore. ‘A Knudsen layer theory for lattice gases.’ *Physica D* **47**(6):241 (1991)
- [29] U. Frisch, B. Hasslacher and Y. Pomeau, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1505 (1986).
- [30] J. Hardy, Yv. Pomeau and O. de Pazzis, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 276 (1973).
- [31] D. d’Humieres, P. Lallemand and U. Frisch, *Europhys. Lett.* **2**, 291 (1986).

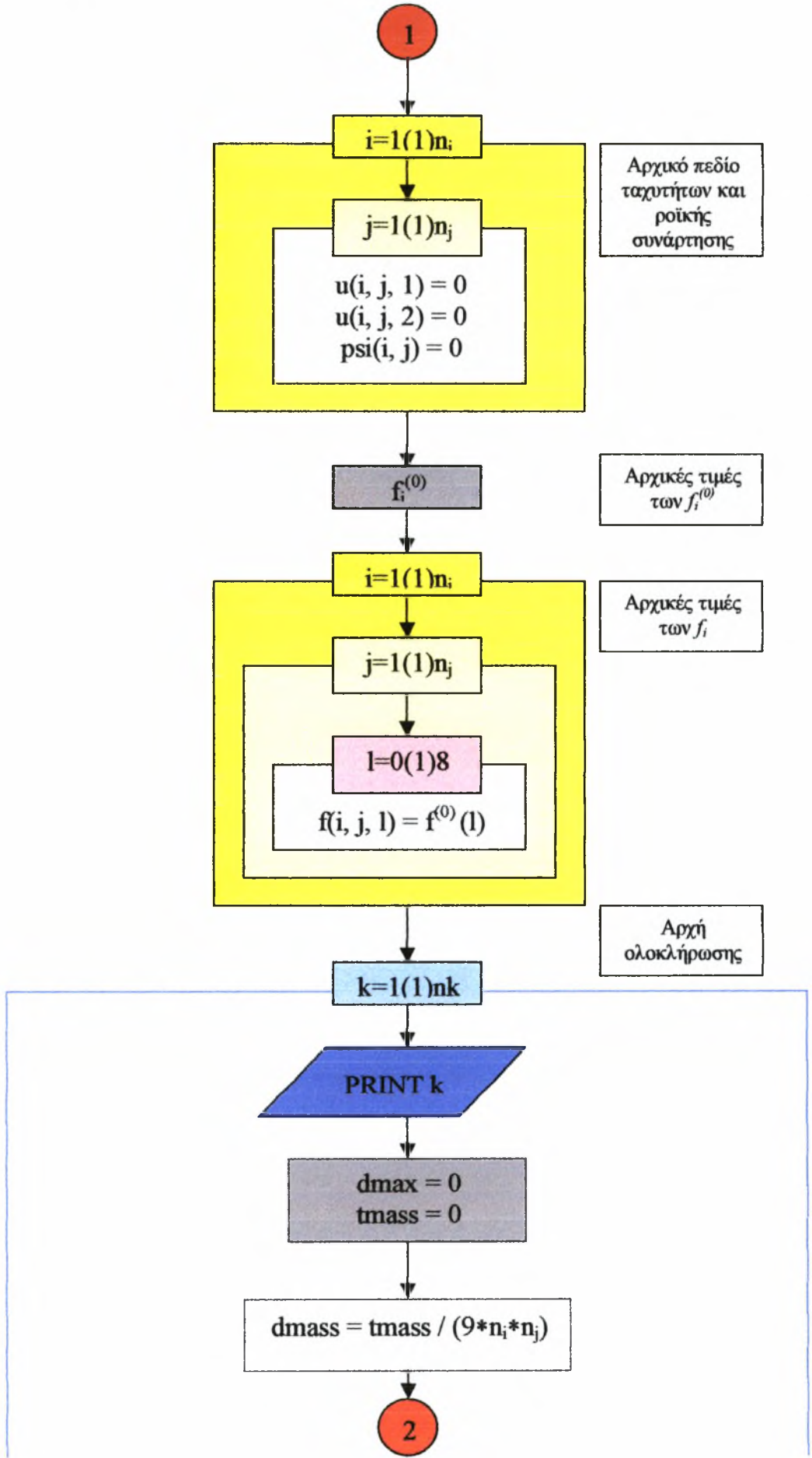
- [32] G. McNamara and G. Zanetti, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2332 (1988).
- [33] F. Higuera and J. Jimenez, *Europhys. Lett.* **9**, 663 (1989).
- [34] F. Higuera and S. Succi, *Europhys. Lett.* **8**, 517 (1989).
- [35] S. Chen, H. Chen, D. Martinez & W. H. Matthaeus, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3776 (1991).
- [36] H. Chen, S. Chen and W. H. Matthaeus, *Phys. Rev. A* **45**, 5339 (1992).
- [37] Y. Qian, D. d’Humières and P. Lallemand, *Europhys. Lett.* **17** (6), 479 (1992).
- [38] Y. Qian, Ph.D thesis, de l’Université Pierre et Marie Curie, January 1990.
- [39] He X, Luo L – S. 1997. ‘A priori derivation of the lattice Boltzmann equation.’ *Phys. Rev. E* **55**:6333 – 36
- [40] Abe T. 1997. ‘Derivation of the lattice Boltzmann method by means of the discrete ordinate method for the Boltzmann equation.’ *J. Comp. Phys.* **131**:241 – 46
- [41] Wolfram S. 1986. Cellular automaton fluids. 1:Basic theory. *J. Stat. Phys.* **45**:471 – 526
- [42] Lavalée P, Boon JP, Noullez A. 1991. ‘Boundaries in lattice gas flows.’ *Physica D* **47**:233 – 40
- [43] Cornubert R, d’Humières D, Levermore D. 1991. ‘A Knudsen layer theory for lattice gases.’ *Physica D* **47**:241 – 59
- [44] Koelman JMVA. 1991. ‘A simple lattice Boltzmann scheme for Navier – Stokes fluid flow.’ *Europhys. Lett.* **15**:603 – 7
- [45] I. Ginzbourg and P. M. Adler, ‘Boundary flow condition analysis for the three – dimensional lattice Boltzmann model.’ *J. Phys. II France* **4**:191 (1994).
- [46] S. P. Vanka, *J. Comput. Phys.* **65**, 138 (1986).
- [47] R. Schreiber and H. B. Keller, *J. Comput. Phys.* **49**, 310 (1983).
- [48] U. Ghia, K. N. Ghia, and C. Y. Shin, *J. Comput. Phys.* **48**, 387 (1982).
- [49] O. Burggraf, *J. Fluid Mech.* **24**, 113 (1966).
- [50] Robert S. Maier, Robert S. Bernard, and Daryl W. Grunau, ‘Boundary conditions for the lattice Boltzmann method’, *Phys. Fluids*, **8** (7) (July, 1996)

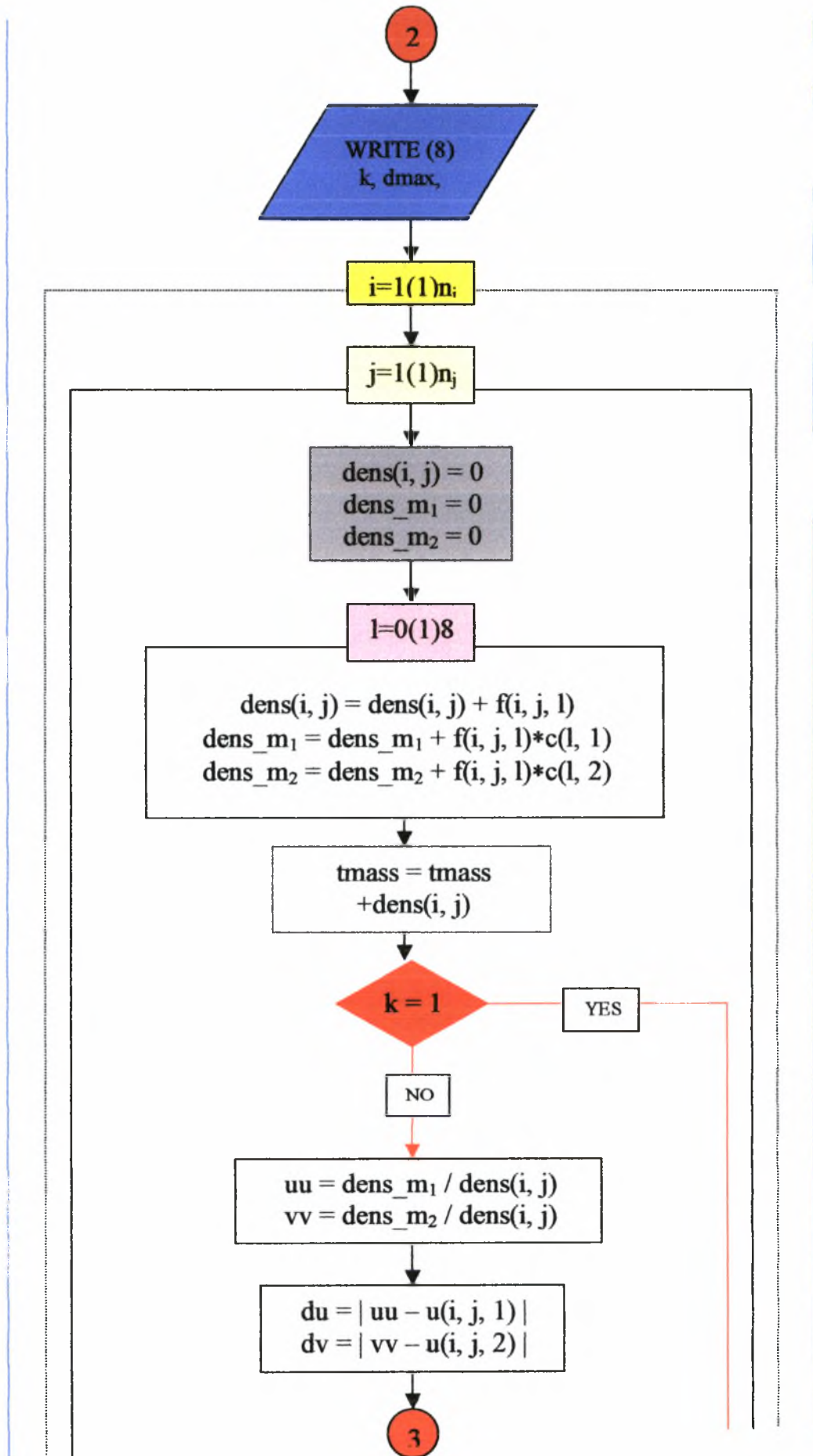
- [51] M. Reider and J. Sterling, ‘Accuracy of discrete-velocity BGK models for the simulation of the incompressible Navier – Stokes equations,’ *Comput. Fluids*, **118**, 459 (1995).

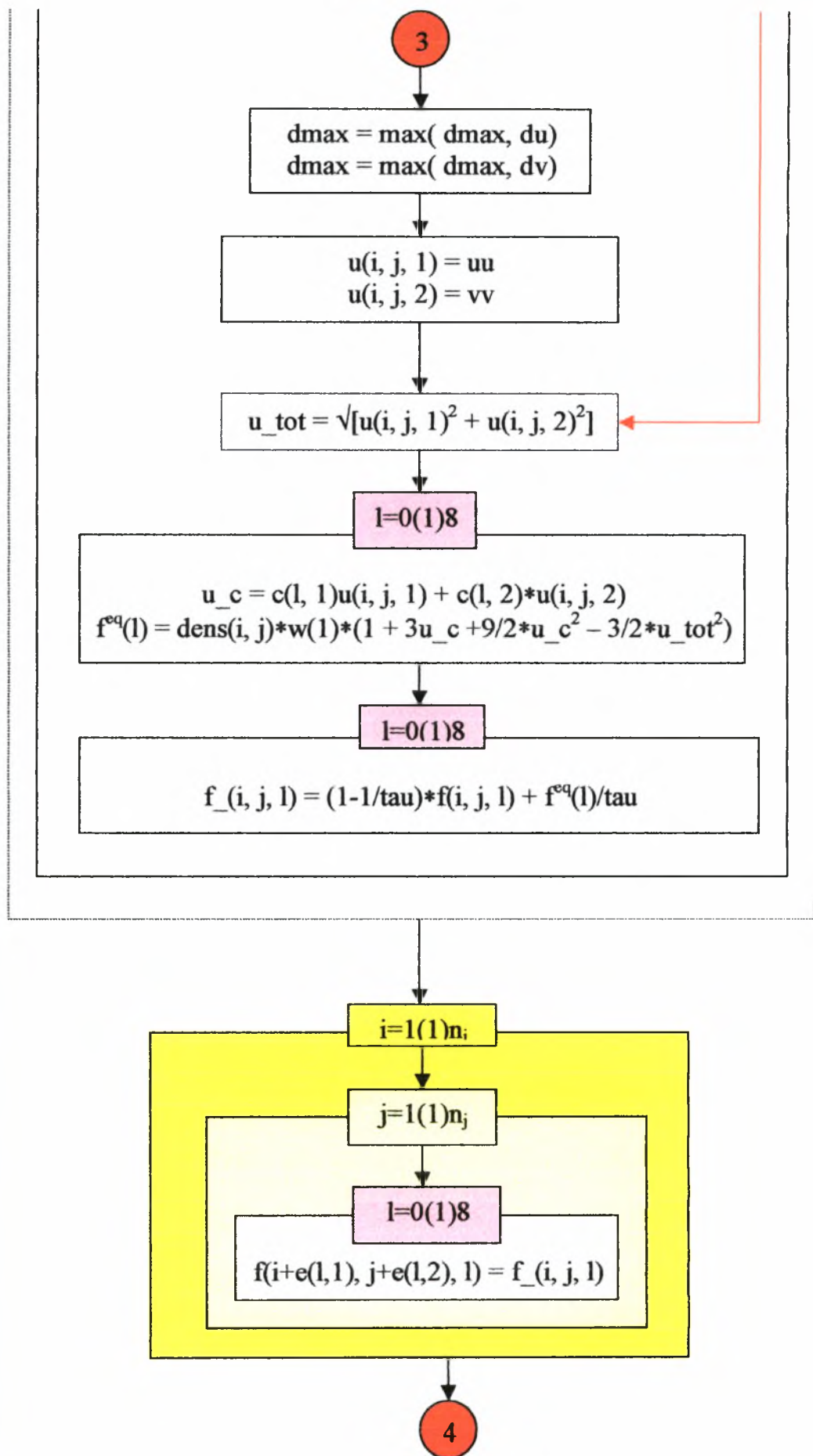
Παράρτημα

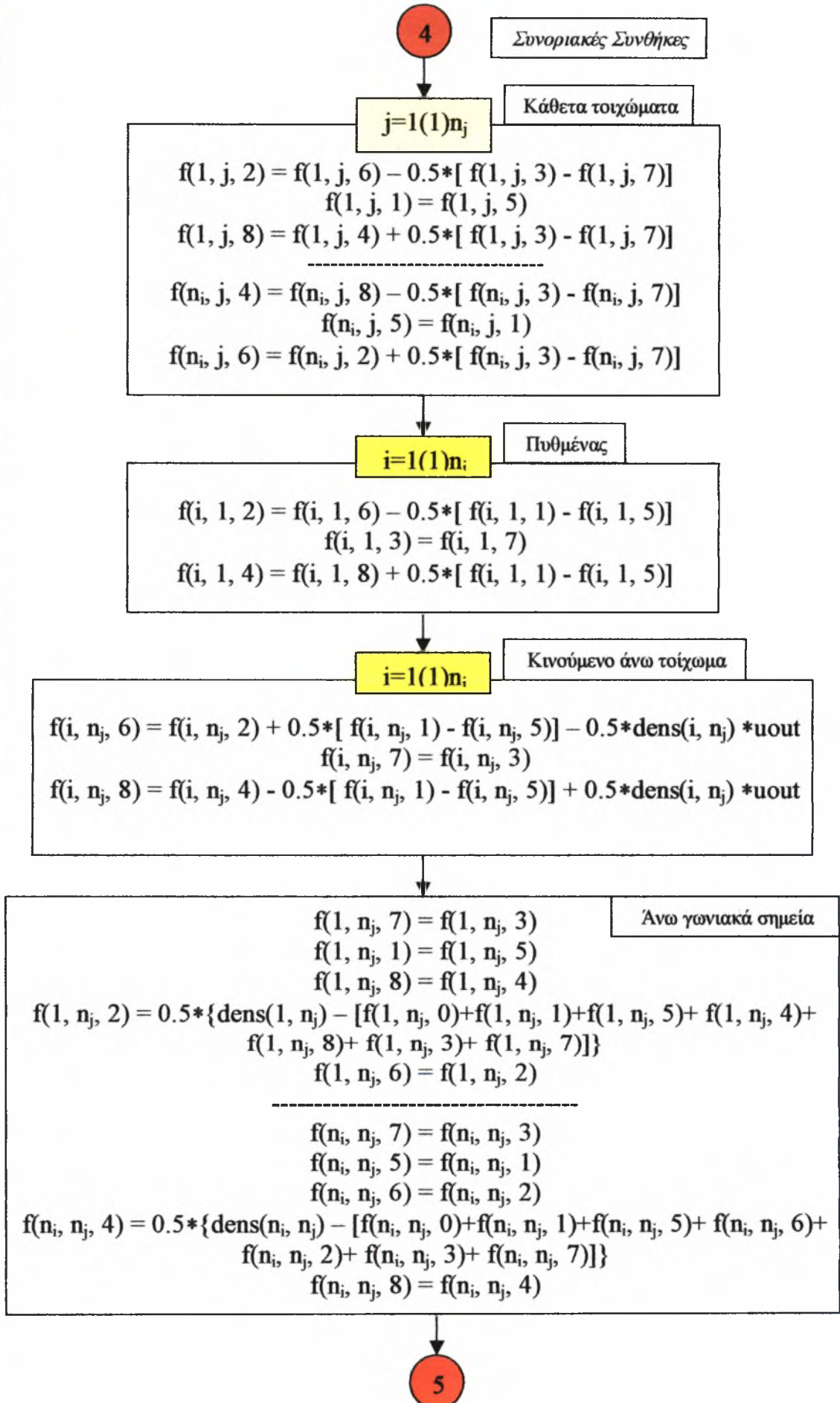
Περιέχονται: Το λογικό διάγραμμα του κώδικα της διδιάστατης ροής σε κοιλότητα.
Οι κώδικες της αναλυτικής λύσης των ροών Poiseuille και Couette.
Οι κώδικες της αριθμητικής λύσης των ροών Poiseuille και Couette.
Ο κώδικας επίλυσης της διδιάστατης ροής σε ορθογωνική κοιλότητα.
Ο κώδικας επίλυσης της ροής σε αγωγό ορθογωνικής διατομής.

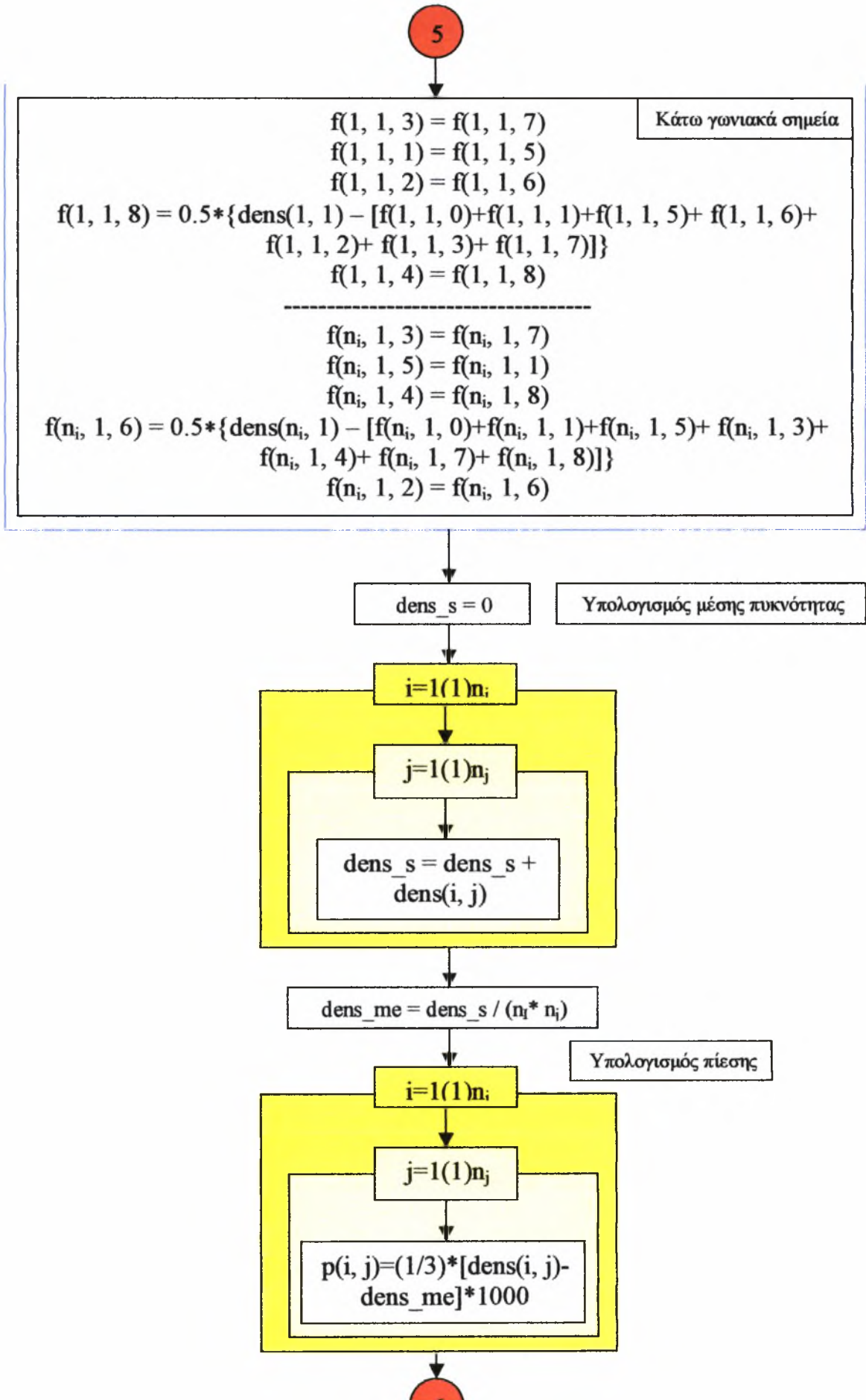


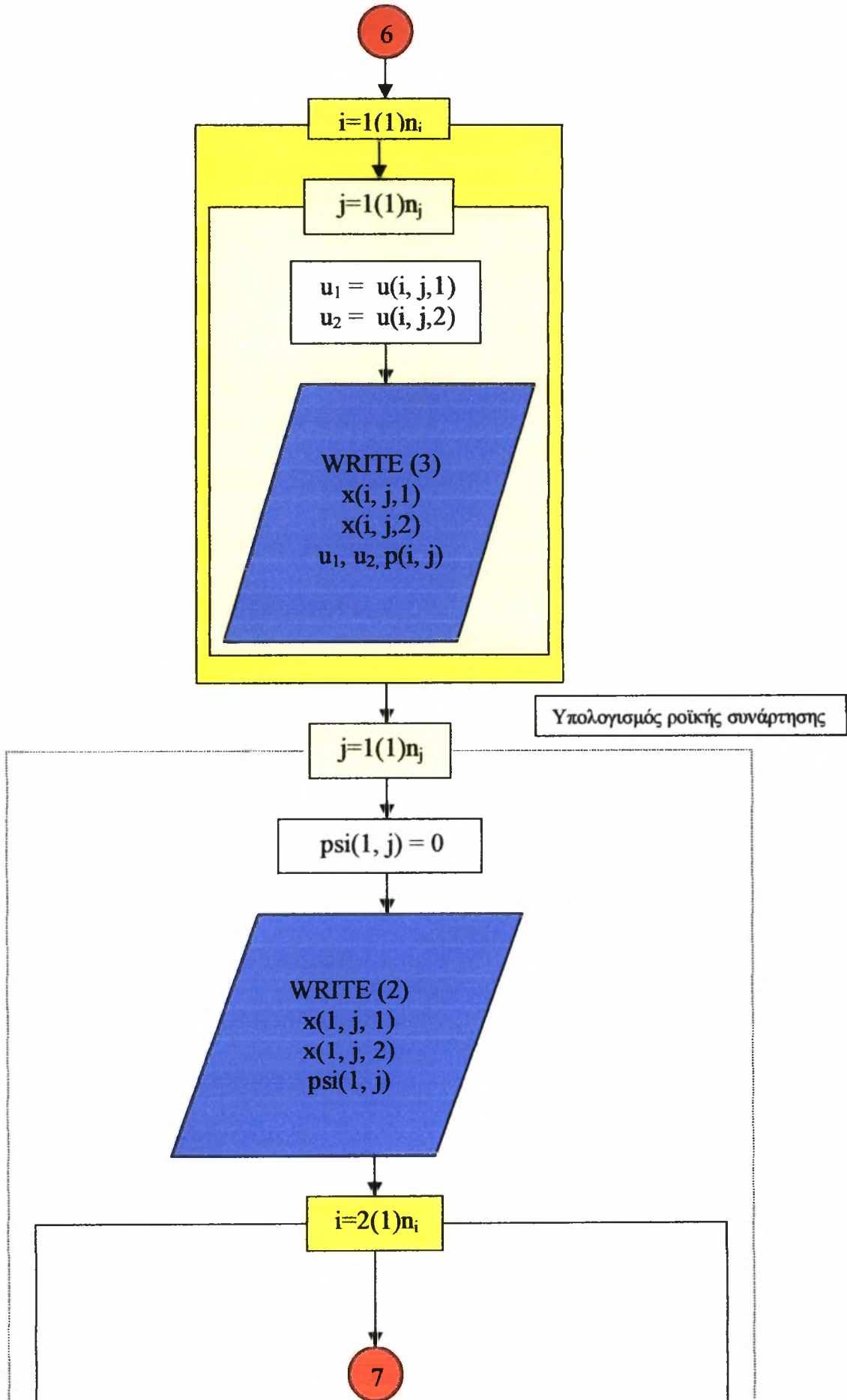


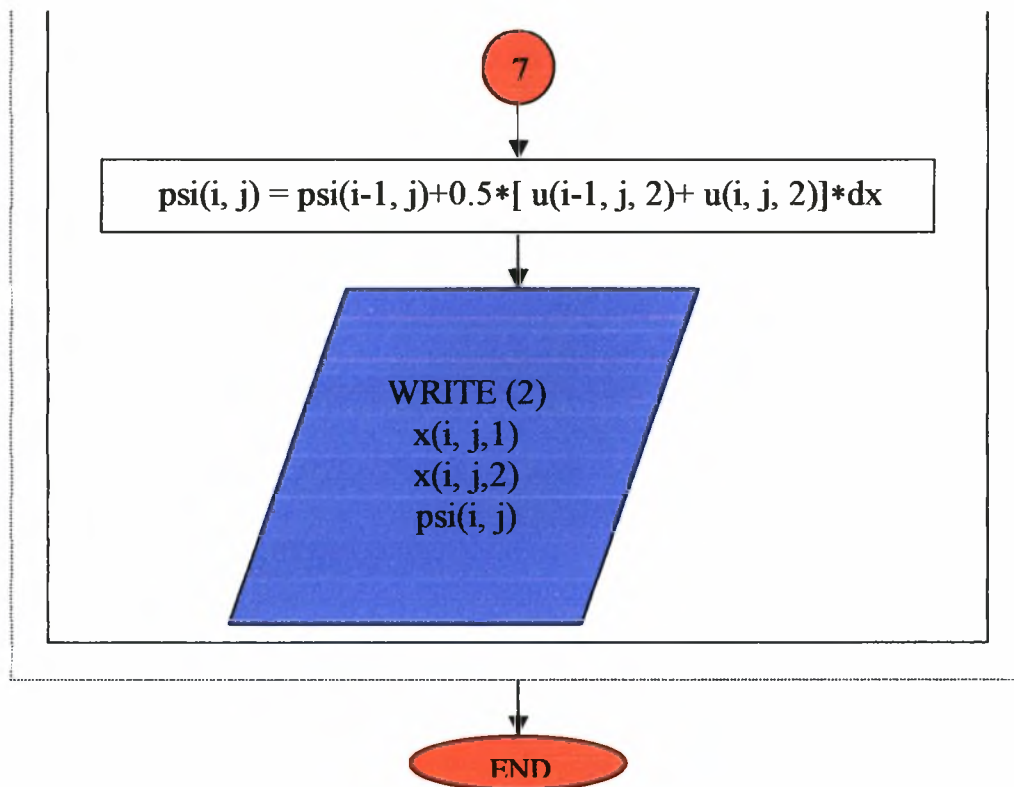












Επεξήγηση Συμβόλων (μεταβλητών)

n_i, n_j	→ αριθμός κόμβων στην x και y κατεύθυνση αντιστοίχως
n_k	→ αριθμός επαναλήψεων
tau	→ χρόνος χαλάρωσης τ (relaxation time)
uout	→ ταχύτητα του άνω συνόρου (κινούμενη πλάκα)
$x(i, j, 1)$	→ τετμημένη
$x(i, j, 2)$	→ τεταγμένη
$u(i, j, 1)$	→ ταχύτητα στην x – κατεύθυνση
$u(i, j, 2)$	→ ταχύτητα στην y – κατεύθυνση
dens(i, j)	→ πυκνότητα σε κάθε κόμβο
dens_m1	→ πυκνότητα ορμής στην x – κατεύθυνση
dens_m2	→ πυκνότητα ορμής στην y – κατεύθυνση
dens_me	→ μέση πυκνότητα
$c(l, 1)$	→ συντεταγμένη διανύσματος ταχύτητας σωματιδίου στην x – κατεύθυνση
$c(l, 2)$	→ συντεταγμένη διανύσματος ταχύτητας σωματιδίου στην y – κατεύθυνση
$w(l)$	→ συντελεστές της f^{eq}
$e(l, 1), e(l, 2)$	→ συν/νες διανυσμάτων κατευθύνσεων στην x και y κατεύθυνση αντιστοίχως
$f(i, j, l)$	→ συνάρτηση κατανομής σωματιδίων
$f_{eq}(l)$	→ συνάρτηση κατανομής σωματιδίων στην κατάσταση ισορροπίας
$f_{-}(i, j, l)$	→ νέα τιμή της συνάρτησης κατανομής σωματιδίων $f(i, j, l)$
$f_0(l)$	→ αρχικές τιμές της $f(i, j, l)$
$p(i, j)$	→ τιμή της πίεσης σε κάθε κόμβο
$\psi(i, j)$	→ τιμή της ροϊκής συνάρτησης σε κάθε κόμβο

```

=====
c              Poiseuille Flow
c
c              Analytical Solution
c=====

Program poiseuille

Parameter (maxj=1000)

double precision f(1:maxj,0:8),dens_(1:maxj),tau,uo,uu,vv,g,v,c13
double precision u_tot,d,c1,c2,c3,c4,c5,c6,c7,c8,c9,c10,c11,c12
double precision c(0:8,2),dens,y,dens_m1,dens_m2
double precision a(2:8),b(2:8),cc(2:8),d(2:8)
integer nj

!
!--- Enter Data-----
!
5  Print*, 'Enter Nj'
   read*,nj
   Print*, 'Enter G=-(dp/dx) '
   read*,g
   Print*, 'Enter Density'
   read*,dens
   Print*, 'Enter Tau'
   read*,tau

!--- Velocity Vectors-----
!
c(0,1)=0.
c(0,2)=0.
c(1,1)=1.
c(1,2)=0.
c(2,1)=1.
c(2,2)=1.
c(3,1)=0.
c(3,2)=1.
c(4,1)=-1.
c(4,2)=1.
c(5,1)=-1.
c(5,2)=0.
c(6,1)=-1.
c(6,2)=-1.
c(7,1)=0.
c(7,2)=-1.
c(8,1)=1.
c(8,2)=-1.

d=1./float(nj-1)
v=((2.*tau-1.)/6.)*d
uo=g*0.5*(1/(dens*v))

!=====
c1=(tau**4)*dens*uo*uo*(d**4)
c2=(tau**3)*dens*uo*uo*(d**4)
c3=tau*tau*dens*uo*uo*(d**4)
c4=tau*tau*dens*uo*uo*d*d
c5=tau*dens*uo*uo*(d**4)
c6=tau*dens*uo*uo*d*d
c7=(tau**3)*dens*uo*uo*d*d*d

```

```

c8=tau*tau*dens*uo*d*d*d
c9=tau*dens*uo*uo*d*d*d
c10=tau*dens*uo*uo*d
c11=tau*tau*dens*uo*d*d
c12=tau*dens*uo*d*d
c13=tau*tau*dens*uo*d
!=====
a(2)=-4.*c1+6.*c2-(7./3.)*c3+(2./3.)*c4+(1./6.)*c5-(1./3.)*c6+(1./
& 9.)*dens-(1./6.)*dens*uo*uo

a(4)=a(2)
b(2)=4.*c7-4.*c8+(2./3.)*c9-(2./3.)*c10
b(4)=-b(2)
cc(2)=-2.*c4+c6+(1./3.)*dens*uo*uo
cc(4)=cc(2)
d(2)=(2./3.)*c10
d(4)=-d(2)
e(2)=-(1./6.)*dens*uo*uo
e(4)=e(2)

a(5)=2.*c1-3.*c2+(7./6.)*c3-(1./3.)*c4-(1./6.)*c11-(1./12.)*c5+(1.
& /6.)*c6+(1./12.)*c12+(1./36.)*dens+(1./12.)*dens*uo*uo+(1./12.)*
& dens*uo+(1./6.)*c13

a(8)=a(5)
b(5)=-2.*c7+2.*c8-(1./3.)*c9+(1./3.)*c10+(1./6.)*tau*dens*uo*d
b(8)=-b(5)
cc(5)=c4-0.5*c6-(1./6.)*dens*uo*uo-(1./12.)*dens*uo
cc(8)=cc(5)
d(5)=-(1./3.)*c10
d(8)=-d(5)
e(5)=(1./12.)*dens*uo*uo
e(8)=e(5)

a(6)=2.*c1-3.*c2+(7./6.)*c3-(1./3.)*c4+(1./6.)*c11-(1./12.)*c5+
& (1./6.)*c6-(1./12.)*c12+(1./36.)*dens+(1./12.)*dens*uo*uo-
& (1./12.)*dens*uo-(1./6.)*c13

a(7)=a(6)
b(6)=-2.*c7+2.*c8-(1./3.)*c9+(1./3.)*c10-(1./6.)*tau*dens*uo*d
b(7)=-b(6)
cc(6)=c4-0.5*c6-(1./6.)*dens*uo*uo+(1./12.)*dens*uo
cc(7)=cc(6)
d(6)=- (1./3.)*c10
d(7)=-d(6)
e(6)=(1./12.)*dens*uo*uo
e(7)=e(6)
!=====

open(1,file='PoiseuilleAN.dat')

y=0.

do j=1,nj

!---Distribution Functions-----

f(j,0)=(4./9.)*dens*(1.-1.5*(uo*(1.-y*y))**2)

f(j,1)=(1./9.)*dens*(1.+3.*uo*(1.-y*y)+3.*(uo*(1.-y*y))**2)+

```



```

& (2./3.)*tau*v*dens*uo*d

f(j,2)=a(2)+ b(2)*y + c(2)*y*y + d(2)*y*y*y + e(2)*y*y*y*y

f(j,3)=(1./9.)*dens*(1.-3.*uo*(1.-y*y)+3.*(uo*(1.-y*y))**2)-
& (2./3.)*tau*v*dens*uo*d

do i=4,8,1
    f(j,i)=a(i)+b(i)*y+c(i)*(y*y)+d(i)*(y*y*y)+e(i)*(y*y*y*y)
enddo
!-----
    dens_(j)=0.
    dens_m1=0.
    dens_m2=0.

!---Density at each node -----

do l=0,8
    dens_(j)=dens_(j)+f(j,l)
    dens_m1=dens_m1+f(j,l)*c(l,1)
    dens_m2=dens_m2+f(j,l)*c(l,2)
enddo

!--- Velocities -----

10      uu=dens_m1/dens_(j)
        vv=dens_m2/dens_(j)

c      u(j,1)=uu
c      u(j,2)=vv

!--- Total Velocity -----
    u_tot=sqrt(uu*uu+vv*vv)

    write(1,100) y,u_tot,uu,vv,dens_(j)

    y=y+d
    enddo

    close (1)
    print*, 'enter new data'
    pause
    goto 5

100    format(5(1x,f11.8))
        stop
        end

```

```

=====
c          The Lattice Boltzmann Method
c
c          BGK Model
c
c          Couette Flow
c
c          Analytical Solution
=====

Program can

Parameter (maxj=1000)

double precision f(1:maxj,0:8),dens_(1:maxj),tau,uout,uu,vv
double precision u_tot,d,c1,c2,c3,c4,c5,c6
double precision c(0:8,2),dens,y,dens_m1,dens_m2
integer nj

print*, '===== '
print*, ' The Lattice Boltzmann Method '
print*
print*, 'BGK Model'
print*
print*, 'Couette Flow'
print*
print*, 'Analytical Solution'
print*
print*, 'Square Lattice'
print*, '===== '
print*

!--- Enter Data-----

5  Print*, 'Enter Number of nodes, Nj'
   read*,nj

Print*, 'Enter Velocity of moving top plate, Uout'
read*,uout

Print*, 'Enter Density, dens'
read*,dens

Print*, 'Enter Relaxation Time, tau'
read*,tau

!--- Velocity Vectors-----

c(0,1)=0.
c(0,2)=0.
c(1,1)=1.
c(1,2)=0.
c(2,1)=1.
c(2,2)=1.
c(3,1)=0.
c(3,2)=1.
c(4,1)=-1.
c(4,2)=1.
c(5,1)=-1.

```

```

c(5,2)=0.
c(6,1)=-1.
c(6,2)=-1.
c(7,1)=0.
c(7,2)=-1.
c(8,1)=1.
c(8,2)=-1.

!-----
d=1./float(nj-1)

open(1,file='couette_an.txt')

write(1,101) 'y','u_tot', 'u', 'v',' density'

y=0.

do j=1,nj

  c1=dens*uout*y
  c2=dens*uout*uout*y*y
  c3=tau*tau*dens*uout*uout*d*d
  c4=tau*dens*uout*uout*d*d
  c5=tau*dens*uout*d
  c6=tau*dens*uout*uout*d*y

!---Distribution Functions-----

  f(j,0)=(4./9.)*dens-(2./3.)*c2

  f(j,1)=(1./9.)*dens+(3./9.)*(c1+c2)

  f(j,2)=(1./6.)*c3-(1./12.)*c4-(1./12.)*c5+
*   (1./36.)*dens-(1./6.)*c6+(1./12.)*c1+(1./12.)*c2

  f(j,3)=-(1./3.)*c3+(1./6.)*c4+(1./9.)*dens+(1./3.)*c6
*   -(1./6.)*c2

  f(j,4)=(1./6.)*c3-(1./12.)*c4+(1./12.)*c5+
*   (1./36.)*dens-(1./6.)*c6-(1./12.)*c1
*   +(1./12.)*c2

  f(j,5)=(1./9.)*dens-(3./9.)*c1+(3./9.)*c2

  f(j,6)=(1./6.)*c3-(1./12.)*c4-(1./12.)*c5+
*   (1./36.)*dens+(1./6.)*c6-(1./12.)*c1
*   +(1./12.)*c2

  f(j,7)=-(1./3.)*c3+(1./6.)*c4+(1./9.)*dens-(1./3.)*c6-(1./6.)*c2

  f(j,8)=(1./6.)*c3-(1./12.)*c4+(1./12.)*c5+
*   (1./36.)*dens+(1./6.)*c6+(1./12.)*
*   *c1+(1./12.)*c2

!-----

  dens_(j)=0.
  dens_m1=0.
  dens_m2=0.

!---Density at each node -----

```

```

do l=0,8
  dens_(j)=dens_(j)+f(j,l)
  dens_m1=dens_m1+f(j,l)*c(l,1)
  dens_m2=dens_m2+f(j,l)*c(l,2)
enddo

!--- Velocities -----

10      uu=dens_m1/dens_(j)
      vv=dens_m2/dens_(j)

c      u(j,1)=uu
c      u(j,2)=vv

!--- Total Velocity -----

      u_tot=sqrt(uu*uu+vv*vv)

      write(1,100) y,u_tot,uu,vv,dens_(j)

      y=y+d
enddo

close (1)
print*, 'enter new data'
pause
goto 5

100    format(5(1x,f12.7))
101    format(5(8x,A9))
stop
end

```

```

=====
c          The Lattice Boltzmann Method
c
c          BGK Model
c
c          Poiseuille Flow
c=====

program pbgk

implicit double precision (a-h)
implicit double precision (o-z)

parameter (maxj=161,maxk=9000000)

dimension x(maxj),u(maxj,2)
dimension c(0:8,2),w(0:8),e(0:8,2),f0(0:8)
dimension f(0:maxj,0:8),feq(0:8),h(0:8)
dimension f_(0:maxj,0:8),dens(maxj)

integer count1,count_rate1,count_max1
integer count2,count_rate2,count_max2
real*4 TA1(2),TA2(2)

integer counter
character*3 answ

print*,'===== '
print*,' The Lattice Boltzmann Method '
print*
print*,'BGK Model'
print*
print*,'Poiseuille Flow'
print*
print*,'Square Lattice'
print*,'===== '
print*

c-----
c READ DATA
c-----
print*,'Enter Data'
print*,'===== '
print*,'Enter Number of nodes, Nj'
read*,nj

print*,'Enter Number of iterations, Nk'
read*,nk

print*,'Enter  $G=-(dp/dx)$ , g'
read*,g

print*,'Enter Kinetic viscosity, vis'
read*,vis

print*,'Enter Density, densf'
read*,densf

print*,'Enter Width of Channel, pl'
read*,pl

```

```

c=====

dy=pl/float(nj-1)
tau=0.5*((6.*vis)/dy)+1.)
umax=(g* pl**2)/(8.*densf*vis)

```

```

c-----
c  SET VARIABLES
c-----
c-----
c  directional vectors
c-----

```

```

e(0,1)=0.
e(0,2)=0.
e(1,1)=1.
e(1,2)=0.
e(2,1)=1.
e(2,2)=1.
e(3,1)=0.
e(3,2)=1.
e(4,1)=-1.
e(4,2)=1.
e(5,1)=-1.
e(5,2)=0.
e(6,1)=-1.
e(6,2)=-1.
e(7,1)=0.
e(7,2)=-1.
e(8,1)=1.
e(8,2)=-1.

```

```

c-----
c
h(0)=0.
h(1)=(1./3.)*g
h(2)=(1./12.)*g
h(3)=0.
h(4)=(-1./12.)*g
h(5)=(-1./3.)*g
h(6)=h(4)
h(7)=0.
h(8)=h(2)

```

```

c-----
c  velocity vectors
c-----

```

```

c(0,1)=0.
c(0,2)=0.
c(1,1)=1.
c(1,2)=0.
c(2,1)=1.
c(2,2)=1.
c(3,1)=0.
c(3,2)=1.
c(4,1)=-1.
c(4,2)=1.
c(5,1)=-1.
c(5,2)=0.
c(6,1)=-1.
c(6,2)=-1.
c(7,1)=0.

```



```

      c(7,2)=-1.
      c(8,1)=1.
      c(8,2)=-1.
c-----
c  coefficients for feq
c-----
      w(0)=4./9.
      w(1)=1./9.
      w(2)=1./36.
      w(3)=1./9.
      w(4)=1./36.
      w(5)=1./9.
      w(6)=1./36.
      w(7)=1./9.
      w(8)=1./36.
c-----
c  set node points
c-----

      do j=1,nj
        x(j)=(j-1)*dy
      enddo

c-----
c  initialize properties
c-----

      do j=1,nj
        u(j,1)=0.
        u(j,2)=0.
      enddo

      f0(0)=(4./9.)*densf
      f0(1)=(1./9.)*densf
      f0(2)=(1./36.)*densf
      f0(3)=(1./9.)*densf
      f0(4)=(1./36.)*densf
      f0(5)=(1./9.)*densf
      f0(6)=(1./36.)*densf
      f0(7)=(1./9.)*densf
      f0(8)=(1./36.)*densf

c-----

      do j=1,nj
        do l=0,8
          f(j,l)=f0(l)
        enddo
      enddo

c-----
c  START TIME INTEGRATION
c-----

      ET1 = ETIME(TA1)
      call system_clock(count1 ,count_ratel, count_max1)
      mysecl=float(count1)/float(count_ratel)
      CALL CPU_TIME ( time_begin )
      tim1=timef()

```

```

counter=1
10  do k=1,nk,1
      print*
      print*, '>>>>>>>'
      print*, 'k=', counter

      print*, 'u_cent/umax', u((nj+1)/2,1)/umax

      do j=1,nj

         dens(j)=0.
         dens_m1=0.
         dens_m2=0.

         do l=0,8
            dens(j)=dens(j)+f(j,l)
            dens_m1=dens_m1+f(j,l)*c(l,1)
            dens_m2=dens_m2+f(j,l)*c(l,2)
         enddo

         if(counter.eq.1) goto 20
         uu=dens_m1/dens(j)
         vv=dens_m2/dens(j)

         u(j,1)=uu
         u(j,2)=vv

c         u(j,1)=(uu+u(j,1))/2.
c         u(j,2)=(vv+u(j,2))/2.

20      u_tot=sqrt(u(j,1)**2+u(j,2)**2)

         do l=0,8,1
            u_c=c(l,1)*u(j,1)+c(l,2)*u(j,2)
            feq(l)=dens(j)*w(l)*(1.+(3.*u_c)+(4.5*(u_c**2))-(1.5*(u_tot**2)
&         ))
         enddo

         do l=0,8,1
            f_(j,l)=(1.-(1./tau))*f(j,l)+(feq(l)/tau)+dy*h(l)
         enddo

      enddo      ! next j

c-----
c  update f
c-----
      do j=1,nj
         do l=0,8
            f(j+e(l,2),l)=f_(j,l)
         enddo
      enddo

c-----
c  boundary conditions
c-----
      f(1,2)=f(1,6)-0.5*(f(1,1)-f(1,5))
      f(1,3)=f(1,7)

```

```

f(1,4)=f(1,8)+0.5*(f(1,1)-f(1,5))

f(nj,6)=f(nj,2)+0.5*(f(nj,1)-f(nj,5))
f(nj,7)=f(nj,3)
f(nj,8)=f(nj,4)-0.5*(f(nj,1)-f(nj,5))

counter=counter+1
if( (u(((nj+1)/2),1)/umax).gt. 0.99) goto 40

c-----
c  END TIME INTEGRATION
c-----

      enddo      ! next k

c-----
c  OUTPUT DATA
c-----
40  open(1,file='P_BGK.txt')
      do j=1,nj
        u1=u(j,1)
        u2=u(j,2)
        write(1,100) x(j),u1/umax,u1,u2,dens(j)
      enddo
      write(1,*) counter-1,vis,umax,tau

      open(2,file='PBGKt.txt')
      ET2 = ETIME(TA2)
      ET=ET2-ET1
      T1=TA2(1)-TA1(1)
      T2=TA2(2)-TA1(2)
      write (2,*) 'user ', t1, ' seconds'
      write (2,*) 'system ', t2, ' seconds'
      write (2,*) 'elapsed ', et, ' seconds'
      call system_clock(count2 ,count_rate2, count_max2)
      mysec2=float(count2)/float(count_rate2)
      write (2,*) 'clock Time ', mysec2 - mysec1, ' seconds'
      CALL CPU_TIME ( time_end )
      write (2,*) 'CPU Time ', time_begin - time_end, ' seconds'
      tim2=timef()
      write(2,*) 'time=',tim2-tim1,' seconds'
      write(2,*) '===== '
      print*, 'Time of operation was',tim2-tim1,'sec'

c-----
      if( (u(((nj+1)/2),1)/umax).lt. 0.99) then
        Print*, 'Check for Convergence!'
        Print*, 'umax=',umax
        close(1)
        pause
        Print*, 'Do you need more iterations? (YES/NO)'
        read*,answ
        if(answ .eq. 'YES') then
          Print*, 'Enter Number of Iterations'
          read*,nk
          open(1,file='P_BGK.txt')
          goto 10
        endif
      endif
c-----

```

```
        close (2)
100    format(5(1x,f15.10))
        stop
    end
```

```

=====
c          The Lattice Boltzmann Method
c
c          BGK Model
c
c          Couette Flow
c=====

program cbgk

implicit double precision (a-h)
implicit double precision (o-z)

parameter (maxj=102,maxk=1000000)

dimension x(maxj),u(maxj,2)
dimension c(0:8,2),w(0:8),e(0:8,2),f0(0:8)
dimension f(0:maxj,0:8),feq(0:8)
dimension f_(0:maxj,0:8),dens(maxj)

integer count1,count_rate1,count_max1
integer count2,count_rate2,count_max2
real*4   TA1(2),TA2(2)

integer      counter
character*3  answ

print*,'===== '
print*,' The Lattice Boltzmann Method '
print*
print*,'BGK Model'
print*
print*,'Couette Flow'
print*
print*,'Square Lattice'
print*,'===== '
print*

c-----
c  READ DATA
c-----

print*,'Enter Data'
print*,'===== '

print*,'Enter Number of nodes, Nj'
read*,nj

print*,'Enter Number of iterations, Nk'
read*,nk

print*,'Enter Velocity of moving top plate, umax'
read*,umax

print*,'Enter Relaxation Time, tau'
read*,tau

print*,'Enter Density, densf'
read*,densf

print*,'Enter Width of Channel, pl'

```

```

read*,pl

c=====

dy=pl/float(nj-1)
vis=((2.*tau-1.)/6.)*dy

c-----
c  SET VARIABLES
c-----
c-----
c  directional vectors
c-----
e(0,1)=0.
e(0,2)=0.
e(1,1)=1.
e(1,2)=0.
e(2,1)=1.
e(2,2)=1.
e(3,1)=0.
e(3,2)=1.
e(4,1)=-1.
e(4,2)=1.
e(5,1)=-1.
e(5,2)=0.
e(6,1)=-1.
e(6,2)=-1.
e(7,1)=0.
e(7,2)=-1.
e(8,1)=1.
e(8,2)=-1.

c-----
c  velocity vectors
c-----
c(0,1)=0.
c(0,2)=0.
c(1,1)=1.
c(1,2)=0.
c(2,1)=1.
c(2,2)=1.
c(3,1)=0.
c(3,2)=1.
c(4,1)=-1.
c(4,2)=1.
c(5,1)=-1.
c(5,2)=0.
c(6,1)=-1.
c(6,2)=-1.
c(7,1)=0.
c(7,2)=-1.
c(8,1)=1.
c(8,2)=-1.

c-----
c  coefficients for feq
c-----
w(0)=4./9.
w(1)=1./9.
w(2)=1./36.
w(3)=1./9.

```



```

w(4)=1./36.
w(5)=1./9.
w(6)=1./36.
w(7)=1./9.
w(8)=1./36.
c-----
c  set node points
c-----

do j=1,nj
  x(j)=(j-1)*dy
enddo

c-----
c  initialize properties
c-----

do j=1,nj
  u(j,1)=0.
  u(j,2)=0.
enddo

f0(0)=(4./9.)*densf
f0(1)=(1./9.)*densf
f0(2)=(1./36.)*densf
f0(3)=(1./9.)*densf
f0(4)=(1./36.)*densf
f0(5)=(1./9.)*densf
f0(6)=(1./36.)*densf
f0(7)=(1./9.)*densf
f0(8)=(1./36.)*densf

c-----

do j=1,nj
  do l=0,8
    f(j,l)=f0(l)
  enddo
enddo

c-----
c  START TIME INTEGRATION
c-----

ET1 = ETIME(TA1)
call system_clock(count1 ,count_rate1, count_max1)
mysecl=float(count1)/float(count_rate1)
CALL CPU_TIME ( time_begin )
tim1=timef()

counter=1
10  do k=1,nk,1
    print*
    print*, '>>>>>>>'
    print*, 'k=', counter

    if (counter.gt.5) then
      print*, 'ucent/(umax/2)=', u((nj+1)/2,1)/(umax/2.)
    end if
  enddo
enddo

```

```

endif

do j=1,nj

  dens(j)=0.
  dens_m1=0.
  dens_m2=0.

  do l=0,8
    dens(j)=dens(j)+f(j,l)
    dens_m1=dens_m1+f(j,l)*c(l,1)
    dens_m2=dens_m2+f(j,l)*c(l,2)
  enddo

  if(counter.eq.1) goto 20
  uu=dens_m1/dens(j)
  vv=dens_m2/dens(j)

  u(j,1)=uu
  u(j,2)=vv

c      u(j,1)=(uu+u(j,1))/2.
c      u(j,2)=(vv+u(j,2))/2.

20    u_tot=sqrt(u(j,1)**2+u(j,2)**2)

      do l=0,8,1
        u_c=c(l,1)*u(j,1)+c(l,2)*u(j,2)
        feq(l)=dens(j)*w(l)*(1.+(3.*u_c)+(4.5*(u_c**2))-(1.5*(u_tot**2)
&      ))
      enddo

      do l=0,8,1
        f_(j,l)=(1.-(1./tau))*f(j,l)+(feq(l)/tau)
      enddo

    enddo    ! next j

c-----
c  update f
c-----
      do j=1,nj
        do l=0,8
          f(j+e(1,2),l)=f_(j,l)
        enddo
      enddo

c-----
c  boundary conditions
c-----

      f(1,2)=f(1,6)-0.5*(f(1,1)-f(1,5))
      f(1,3)=f(1,7)
      f(1,4)=f(1,8)+0.5*(f(1,1)-f(1,5))

      f(nj,6)=f(nj,2)+0.5*(f(nj,1)-f(nj,5))-0.5*dens(nj)*umax
      f(nj,7)=f(nj,3)
      f(nj,8)=f(nj,4)-0.5*(f(nj,1)-f(nj,5))+0.5*dens(nj)*umax

```

```

        counter=counter+1
        if( (u(((nj+1)/2),1)/(umax/2.)) .gt. 0.99) goto 40
c-----
c   END TIME INTEGRATION
c-----
        enddo      ! next k

c-----
c   OUTPUT DATA
c-----
40    open(1,file='C_BGK.txt')
        do j=1,nj
            u1=u(j,1)
            u2=u(j,2)
            write(1,100) x(j),u1,u2,dens(j)
        enddo
        write(1,*) counter-1,vis,tau

        open(2,file='CBGKt.txt')
        ET2 = ETIME(TA2)
        ET=ET2-ET1
        T1=TA2(1)-TA1(1)
        T2=TA2(2)-TA1(2)
        write (2,*) 'user ', t1, ' seconds'
        write (2,*) 'system ', t2, ' seconds'
        write (2,*) 'elapsed ', et, ' seconds'
        call system_clock(count2 ,count_rate2, count_max2)
        mysec2=float(count2)/float(count_rate2)
        write (2,*) 'clock Time ', mysec2 - mysec1, ' seconds'
        CALL CPU_TIME ( time_end )
        write (2,*) 'CPU Time ', time_begin - time_end, ' seconds'
        tim2=timef()
        write(2,*) 'time=',tim2-tim1,' seconds'
        write(2,*) '=====
        print*, 'Time of operation was',tim2-tim1,'sec'

c-----
        if( (u(((nj+1)/2),1)/(umax/2.)) .lt. 0.99 ) then
            Print*, 'Check for Convergence!'
            close(1)
            pause
            Print*, 'Do you need more iterations? (YES/NO)'
            read*,answ
            if(answ .eq. 'YES') then
                Print*, 'Enter Number of Iterations'
                read*,nk
                open(1,file='C_BGK.txt')
                goto 10
            endif
        endif
c-----

        close(2)

100    format(5(1x,f15.10))

        stop
        end

```

```

=====
c      Discrete Velocity Code for Driven Cavity Flow
c
c      using the Lattice-Boltzmann method
c
c      (Incompressible Flow)
=====
c
  program main

    implicit double precision (a-h,o-z)

    parameter (maxi=260,maxj=260)

    dimension x(maxi,maxj,2)
    dimension c(0:8,2),w(0:8),e(0:8,2)
    dimension f(0:maxi+1,0:maxj+1,0:8),p(maxi,maxj)
    dimension f_(maxi,maxj,0:8),ub(2),psi(maxi,maxj)
    dimension feq(maxi,maxj,0:8)

    common/veloc/ up(maxi,maxj,2),u(maxi,maxj,2)
    common/crit/ cr_u,cr_v

    integer e

    open(1,file='input')
    open(2,file='uvplot')
    open(3,file='psi')
    open(9,file='uin')
    open(10,file='uout')

c-----
c  READ DATA
c-----
    read(1,*) ni,nj,nk
    read(1,*) tsc,dens0
    read(1,*) ubx,uby
    read(1,*) cr_u,cr_v,iop
    read(1,*) iread

c-----
c  SET VARIABLES
c-----
    e(0,1)=0.
    e(0,2)=0.

    e(1,1)=1.
    e(1,2)=0.

    e(2,1)=1.
    e(2,2)=1.

    e(3,1)=0.
    e(3,2)=1.

    e(4,1)=-1.
    e(4,2)=1.

    e(5,1)=-1.
    e(5,2)=0.

```

```

e(6,1)=-1.
e(6,2)=-1.

e(7,1)=0.
e(7,2)=-1.

e(8,1)=1.
e(8,2)=-1.
c-----
c  discrete velocities
c-----
c(0,1)=0.
c(0,2)=0.

c(1,1)=1.
c(1,2)=0.

c(2,1)=1.
c(2,2)=1.

c(3,1)=0.
c(3,2)=1.

c(4,1)=-1.
c(4,2)=1.

c(5,1)=-1.
c(5,2)=0.

c(6,1)=-1.
c(6,2)=-1.

c(7,1)=0.
c(7,2)=-1.

c(8,1)=1.
c(8,2)=-1.
c-----
c  coefficients for feq
c-----
w(0)=4./9.
w(1)=1./9.
w(2)=1./36.
w(3)=1./9.
w(4)=1./36.
w(5)=1./9.
w(6)=1./36.
w(7)=1./9.
w(8)=1./36.
c-----
c  set node points
c-----
do i=1,ni
do j=1,nj
x(i,j,1)=(i-1)
x(i,j,2)=(j-1)
enddo
enddo
c-----
c  initialize velocities

```

```

c-----
      ub(1)=ubx
      ub(2)=uby

      do i=1,ni
        do j=1,nj
          u(i,j,1)=0.0
          u(i,j,2)=0.0
        enddo
      enddo

      do i=1,ni
        do j=1,nj
          do l=0,8
            f(i,j,l)=w(l)*dens0
          enddo
        enddo
      enddo

c-----
      if(iread.ne.0) then

        do i=1,ni
          do j=1,nj

            read(9,102) u(i,j,1),u(i,j,2),p(i,j)

            u_tot=sqrt(u(i,j,1)**2+u(i,j,2)**2)

            do l=0,8
              u_c=c(l,1)*u(i,j,1)+c(l,2)*u(i,j,2)
              f(i,j,l)=dens0*w(l)*(p(i,j)+3.*u_c+9./2.*u_c**2-3/2.*u_tot**2)
            enddo
          enddo
        enddo

      endif

c-----
c  START TIME INTEGRATION
c-----
      do k=1,nk
        print*
        print*, '>>>>>>>'
        print*, k

c-----
c  store previous values
c-----
      do i=1,ni
        do j=1,nj
          up(i,j,1)=u(i,j,1)
          up(i,j,2)=u(i,j,2)
        enddo
      enddo

      do i=1,ni
        do j=1,nj

          sump=0.

```



```

dens_m1=0.
dens_m2=0.

do l=0,8

    dens_m1=dens_m1+f(i,j,l)*c(l,1)
    dens_m2=dens_m2+f(i,j,l)*c(l,2)
    sump=sump+feq(i,j,l)

enddo

u(i,j,1)=.5*(dens_m1/dens0+up(i,j,1))
u(i,j,2)=.5*(dens_m2/dens0+up(i,j,2))
p(i,j)=sump/dens0

u_tot=sqrt(u(i,j,1)**2+u(i,j,2)**2)

do l=0,8
    u_c=c(l,1)*u(i,j,1)+c(l,2)*u(i,j,2)
    feq(i,j,1)=dens0*w(l)*(p(i,j)+3.*u_c+9./2.*u_c**2-3/2.*u_tot**
&      2)
    f_(i,j,1)=f(i,j,1)-1./tsc*(f(i,j,1)-feq(i,j,1))
enddo

enddo ! next j

enddo ! next i

c-----
c  update f
c-----
    do i=1,ni
        do j=1,nj
            do l=0,8
                f(i+e(l,1),j+e(l,2),l)=f_(i,j,l)
            enddo
        enddo
    enddo

c-----
c  BOUNDARY CONDITIONS
c-----

c-----
c  j=1, bottom
c-----

    do i=2,ni-1

        f(i,1,2)=f(i,1,6)-0.5*(f(i,1,1)-f(i,1,5))
        f(i,1,3)=f(i,1,7)
        f(i,1,4)=f(i,1,8)+0.5*(f(i,1,1)-f(i,1,5))

    enddo

c-----
c  i=1, left wall
c-----

```

```

do j=2,nj-1

    f(1,j,2)=f(1,j,6)-0.5*(f(1,j,3)-f(1,j,7))
    f(1,j,1)=f(1,j,5)
    f(1,j,8)=f(1,j,4)+0.5*(f(1,j,3)-f(1,j,7))

enddo

c-----
c i=ni, right wall
c-----

do j=2,nj-1

    f(ni,j,4)=f(ni,j,8)-0.5*(f(ni,j,3)-f(ni,j,7))
    f(ni,j,5)=f(ni,j,1)
    f(ni,j,6)=f(ni,j,2)+0.5*(f(ni,j,3)-f(ni,j,7))

enddo

c-----
c i=1,j=1 bottom-left corner
c-----

    f(1,1,1)=f(1,1,5)
    f(1,1,2)=f(1,1,6)
    f(1,1,3)=f(1,1,7)
    f(1,1,4)=0.5*(dens0-f(1,1,0)-2.*(f(1,1,1)+f(1,1,2)+f(1,1,3)))
    f(1,1,8)=f(1,1,4)

c-----
c i=ni,j=1 bottom-right corner
c-----

    f(ni,1,5)=f(ni,1,1)
    f(ni,1,4)=f(ni,1,8)
    f(ni,1,3)=f(ni,1,7)
    f(ni,1,2)=0.5*(dens0-f(ni,1,0)
&                -2.*(f(ni,1,3)+f(ni,1,4)+f(ni,1,5)))
    f(ni,1,6)=f(ni,1,2)

c-----
c j=nj Moving Wall
c-----

u_tot=sqrt(ub(1)**2+ub(2)**2)

do i=1,ni

do l=0,8
c      u_c=c(1,1)*ub(1)+c(1,2)*ub(2)
c      f(i,nj,1)=dens0*w(l)*(
c      &                p(i,j)+3.*u_c
c      &                +9./2.*u_c**2
c      &                -3./2.*u_tot**2
c      &                )
c      enddo

    f(i,nj,7)=f(i,nj,3)

```

```

        f(i,nj,6)=f(i,nj,2)+0.5*(f(i,nj,1)-f(i,nj,5))
&          -0.5*dens0*ub(1)
        f(i,nj,8)=f(i,nj,4)-0.5*(f(i,nj,1)-f(i,nj,5))
&          +0.5*dens0*ub(1)

        enddo

c-----
c i=1,j=nj upper-left corner
c-----

        f(1,nj,1)=f(1,nj,5)
        f(1,nj,8)=f(1,nj,4)
        f(1,nj,7)=f(1,nj,3)
        f(1,nj,2)=0.5*(dens0-f(1,nj,0)
&          -2.*(f(1,nj,1)+f(1,nj,8)+f(1,nj,7)))
        f(1,nj,6)=f(1,nj,2)

c-----
c i=ni,j=nj upper-right corner
c-----

        f(ni,nj,5)=f(ni,nj,1)
        f(ni,nj,6)=f(ni,nj,2)
        f(ni,nj,7)=f(ni,nj,3)
        f(ni,nj,4)=0.5*(dens0-f(ni,nj,0)
&          -2.*(f(ni,nj,5)+f(ni,nj,6)+f(ni,nj,7)))
        f(ni,nj,8)=f(ni,nj,4)

c-----

        if(k.eq.1) goto 199
        call check(ni,nj,lconv,iop)
        if(lconv.eq.1) goto 200
199    continue

c-----
c  CONTINUE TIME INTEGRATION
c-----

        enddo ! next k
200    continue
c-----
c  OUTPUT DATA
c-----

        do i=1,ni
            do j=1,nj
                write(2,100) x(i,j,1),x(i,j,2),u(i,j,1),u(i,j,2),p(i,j)
                write(10,102) u(i,j,1),u(i,j,2),p(i,j)
            enddo
        enddo

        do j=1,nj
            psi(1,j)=0.0
            do i=2,ni
                psi(i,j)=psi(i-1,j)-u(i,j,2)*dy
            enddo
        enddo
        do i=1,ni
            do j=1,nj

```

```

        write(3,101) x(i,j,1),x(i,j,2),psi(i,j)
        enddo
    enddo
100  format(5(1x,f12.6))
101  format(3(1x,f12.6))
102  format(3(1x,f12.9))

c-----
c  END OF PROGRAM
c-----

        stop
        end

c-----
c  CHECK FOR CONVERGENCE
c-----
        subroutine check(ni,nj,lconv,iop)

        implicit double precision (a-h,o-z)

        parameter (maxi=260,maxj=260)

        common/veloc/ up(maxi,maxj,2),u(maxi,maxj,2)
        common/crit/ cr_u,cr_v

        ddu=0.0
        ddv=0.0
        lu=0
        lv=0
        umax=0.0
        vmax=0.0

        do i=1,ni
            do j=1,nj

                du=u(i,j,1)-up(i,j,1)
                dv=u(i,j,2)-up(i,j,2)

                if(abs(du).gt.ddu) ddu=abs(du)
                if(abs(dv).gt.ddv) ddv=abs(dv)

c-----

                if(abs(u(i,j,1)).gt.umax) umax=abs(u(i,j,1))
                if(abs(u(i,j,2)).gt.vmax) vmax=abs(u(i,j,2))

c-----

            enddo
        enddo

c-----
c  Relative or absolute convergence ?
c-----

        if(iop.eq.0) then ! absolute convergence

            if(ddu.le.cr_u) lu=1
            if(ddv.le.cr_v) lv=1

```

```

lconv=lu*lv

print*, ddu,ddv

    else ! relative convergence

ddu=ddu/umax
ddv=ddv/vmax

if(ddu.le.cr_u) lu=1
if(ddv.le.cr_v) lv=1

if(umax.lt.1.e-09) lu=1
if(vmax.lt.1.e-09) lv=1

lconv=lu*lv

print*, ddu,ddv

endif

return
end

```

```

=====
c          Discrete Velocity Code for Duct Flow
c
c          using the Lattice-Boltzmann method
=====

program duct

implicit double precision (a-h,o-z)

parameter (maxj=80,maxk=80)

dimension x(maxj,maxk,2),u(maxj,maxk,3)
dimension c(0:15,3),w(0:15),e(0:15,3),f0(0:15),h(0:15)
dimension f(0:maxj,0:maxk,0:15),feq(0:15)
dimension f_(0:maxj,0:maxk,0:15),dens(maxj,maxk)
dimension fp(0:maxj,0:maxk,0:15)

integer e,nit,numer
character(3) ans

open(3,file='duct.txt')

c-----
c  ENTER DATA
c-----
      print*, 'Enter Data Nj,Nk,Nm,vis,densf,G'
      print*, '=====
      print*, 'Enter Number of Nodes at y-direction, Nj'
      read(*,*) nj
      print*, 'Enter Number of Nodes at z-direction, Nk'
      read(*,*) nk
      print*, 'Enter Number of Iterations, Nm'
      read(*,*) nm
c      print*, 'Enter Viscosity, vis'
c      read(*,*) vis
      print*, 'Enter Relaxation Time, tau'
      read(*,*) tau
      print*, 'Enter Density, densf'
      read(*,*) densf
      print*, 'Enter G'
      read(*,*) G

c      tau=0.5*((6.*vis)/DELTA+1.)
c      DELTA=1./float(nj-1)
      delta=1.
      vis=((2.*tau-1.)/6.)*delta

c-----
c  SET VARIABLES
c-----
c-----
c  directional vectors
c-----

      e(0,1)=0.0
      e(0,2)=0.0
      e(0,3)=0.0

```


e(1,1)=1.0
e(1,2)=0.0
e(1,3)=0.0

e(2,1)=0.0
e(2,2)=0.0
e(2,3)=-1.0

e(3,1)=-1.0
e(3,2)=0.0
e(3,3)=0.0

e(4,1)=0.0
e(4,2)=0.0
e(4,3)=1.0

e(5,1)=0.0
e(5,2)=1.0
e(5,3)=0.0

e(6,1)=0.0
e(6,2)=-1.0
e(6,3)=0.0

e(7,1)=1.0
e(7,2)=1.0
e(7,3)=1.0

e(8,1)=1.0
e(8,2)=1.0
e(8,3)=-1.0

e(9,1)=-1.0
e(9,2)=1.0
e(9,3)=-1.0

e(10,1)=-1.0
e(10,2)=1.0
e(10,3)=1.0

e(11,1)=1.0
e(11,2)=-1.0
e(11,3)=1.0

e(12,1)=1.0
e(12,2)=-1.0
e(12,3)=-1.0

e(13,1)=-1.0
e(13,2)=-1.0
e(13,3)=-1.0

e(14,1)=-1.0
e(14,2)=-1.0
e(14,3)=1.0

c-----
c velocity vectors

c-----

c(0,1)=0.0
c(0,2)=0.0
c(0,3)=0.0

c(1,1)=1.0
c(1,2)=0.0
c(1,3)=0.0

c(2,1)=0.0
c(2,2)=0.0
c(2,3)=-1.0

c(3,1)=-1.0
c(3,2)=0.0
c(3,3)=0.0

c(4,1)=0.0
c(4,2)=0.0
c(4,3)=1.0

c(5,1)=0.0
c(5,2)=1.0
c(5,3)=0.0

c(6,1)=0.0
c(6,2)=-1.0
c(6,3)=0.0

c(7,1)=1.0
c(7,2)=1.0
c(7,3)=1.0

c(8,1)=1.0
c(8,2)=1.0
c(8,3)=-1.0

c(9,1)=-1.0
c(9,2)=1.0
c(9,3)=-1.0

c(10,1)=-1.0
c(10,2)=1.0
c(10,3)=1.0

c(11,1)=1.0
c(11,2)=-1.0
c(11,3)=1.0

c(12,1)=1.0
c(12,2)=-1.0
c(12,3)=-1.0

c(13,1)=-1.0
c(13,2)=-1.0
c(13,3)=-1.0

c(14,1)=-1.0
c(14,2)=-1.0
c(14,3)=1.0

```
c-----  
c          h(i)  
c-----
```

```
h(0)=0.  
h(1)=(1./4.)*G  
h(2)=0.  
h(3)=-(1./4.)*G  
h(4)=0.  
h(5)=0.  
h(6)=0.  
h(7)=(1./16.)*G  
h(8)=(1./16.)*G  
h(9)=-(1./16.)*G  
h(10)=-(1./16.)*G  
h(11)=(1./16.)*G  
h(12)=(1./16.)*G  
h(13)=-(1./16.)*G  
h(14)=-(1./16.)*G
```

```
c-----  
c  coefficients for feq  
c-----
```

```
w(0)=2./9.  
  
w(1)=1./9.  
w(2)=1./9.  
w(3)=1./9.  
w(4)=1./9.  
w(5)=1./9.  
w(6)=1./9.  
  
w(7)=1./72.  
w(8)=1./72.  
w(9)=1./72.  
w(10)=1./72.  
w(11)=1./72.  
w(12)=1./72.  
w(13)=1./72.  
w(14)=1./72.
```

```
c-----  
c  set node points  
c-----
```

```
do j=1,nj  
  do k=1,nk  
    x(j,k,1)=(j-1)*DELTA  
    x(j,k,2)=(k-1)*DELTA  
  enddo  
enddo
```

```
c-----  
c  initialize properties  
c-----
```

```
do j=1,nj
```

```

do k=1,nk
  u(j,k,1)=0.0
  u(j,k,2)=0.0
  u(j,k,3)=0.0
enddo
enddo

f0(0)=(2./9.)*densf

f0(1)=(1./9.)*densf
f0(2)=(1./9.)*densf
f0(3)=(1./9.)*densf
f0(4)=(1./9.)*densf
f0(5)=(1./9.)*densf
f0(6)=(1./9.)*densf

f0(7)=(1./72.)*densf
f0(8)=(1./72.)*densf
f0(9)=(1./72.)*densf
f0(10)=(1./72.)*densf
f0(11)=(1./72.)*densf
f0(12)=(1./72.)*densf
f0(13)=(1./72.)*densf
f0(14)=(1./72.)*densf

do j=1,nj
  do k=1,nk
    do l=0,14
      f(j,k,l)=f0(l)
    enddo
  enddo
enddo

c-----
c  START TIME INTEGRATION
c-----

numer=1

55 do m=1,nm
  print*
  print*,'>>>>>>>'
  print*,numer
  print*,'dmax ux=',du
  print*,'dmax=',dmax
  PRINT*,u((nj+1)/2,(nk+1)/2,1)
  if(NUMER .gt. 3 .and. du .lt. 1.E-011) then
c    if(NUMER .gt. 3 .and. u((nj+1)/2,(nk+1)/2,1) .gt. 0.0899) then

      Print*,'END OF PROCESS'
      do j=1,nj
        do k=1,nk
          u1=u(j,k,1)
          u2=u(j,k,2)
          u3=u(j,k,3)
          write(3,100) x(j,k,1),x(j,k,2),u1,u2,u3,dens(j,k)

        enddo
      enddo
      write(3,*) NUMER-1, TAU, G, VIS

```

```

        stop
    endif

    dmax=0.0

do j=1,nj
do k=1,nk
do l=0,14
    fp(j,k,l)=f_(j,k,l)
enddo
enddo
enddo

if (numer.eq.1) then
do j=1,nj
do k=1,nk
do l=0,14
    fp(j,k,l)=f(j,k,l)
enddo
enddo
enddo
endif

do j=1,nj
do k=1,nk

    dens(j,k)=0.0
    dens_m1=0.0
    dens_m2=0.0
    dens_m3=0.0

do l=0,14
    dens(j,k)=dens(j,k)+f(j,k,l)
    dens_m1=dens_m1+f(j,k,l)*c(1,1)
    dens_m2=dens_m2+f(j,k,l)*c(1,2)
    dens_m3=dens_m3+f(j,k,l)*c(1,3)
enddo

    if(numer.eq.1) goto 77
    uu=dens_m1/dens(j,k)
    vv=dens_m2/dens(j,k)
    ww=dens_m3/dens(j,k)
    if(j.eq.1) goto 78
    if(j.eq.nj) goto 78
    if(k.eq.1) goto 78
    if(k.eq.nk) goto 78
    du=abs(uu-u(j,k,1))
    dv=abs(vv-u(j,k,2))
    dw=abs(ww-u(j,k,3))
    dmax=max(dmax,du)
    dmax=max(dmax,dv)
    dmax=max(dmax,dw)
78 continue
    u(j,k,1)=uu
    u(j,k,2)=vv
    u(j,k,3)=ww

```

```

c      u(j,k,1)=(uu+u(j,k,1))/2.
c      u(j,k,2)=(vv+u(j,k,2))/2.
c      u(j,k,3)=(ww+u(j,k,3))/2.

77      u_tot=sqrt(u(j,k,1)**2+u(j,k,2)**2+u(j,k,3)**2)

      do l=0,14
        u_c=c(l,1)*u(j,k,1)+c(l,2)*u(j,k,2)+c(l,3)*u(j,k,3)
        feq(l)=dens(j,k)*w(l)*(1.+3.*u_c+(9./2.)*(u_c**2)-(3./2.)*(u_tot
&      **2))
        enddo

      do l=0,14
        f_(j,k,1)=(1.-1./tau)*f(j,k,1)+(feq(l)/tau)+DELTA*h(l)
        enddo

      enddo      ! next k
    enddo      ! next j

c-----
c  update f
c-----
      do j=1,nj
        do k=1,nk
          do l=0,14
            f(j+e(1,2),k+e(1,3),l)=f_(j,k,l)
          enddo
        enddo
      enddo

c=====
c      Solid Wall Boundary Conditions
c=====

c-----
c      Bottom (13 - 14)
c-----

      do k=1,nk

        f(1,k,5)=f(1,k,6)
        f(1,k,9)=f(1,k,11)
        f(1,k,10)=f(1,k,12)
        f(1,k,7)=f(1,k,13)
        f(1,k,8)=f(1,k,14)

        dens_m1bc=0.0
        dens_m2bc=0.0
        dens_m3bc=0.0

        do l=0,14
          dens_m1bc=dens_m1bc+f(1,k,l)*c(l,1)
          dens_m2bc=dens_m2bc+f(1,k,l)*c(l,2)
          dens_m3bc=dens_m3bc+f(1,k,l)*c(l,3)
        enddo

        f(1,k,9)=f(1,k,9)-0.25*(dens_m1bc*e(9,1)+dens_m2bc*e(9,2)+
&      dens_m3bc*e(9,3))

```

```

f(1,k,10)=f(1,k,10)-0.25*(dens_m1bc*e(10,1)+dens_m2bc*
& e(10,2)+dens_m3bc*e(10,3))
f(1,k,7)=f(1,k,7)-0.25*(dens_m1bc*e(7,1)+dens_m2bc*
& e(7,2)+dens_m3bc*e(7,3))
f(1,k,8)=f(1,k,8)-0.25*(dens_m1bc*e(8,1)+dens_m2bc*
& e(8,2)+dens_m3bc*e(8,3))

enddo

```

```

c-----
c      Inside Wall (13 - 9)
c-----
do j=1,nj

f(j,1,4)=f(j,1,2)
f(j,1,10)=f(j,1,12)
f(j,1,7)=f(j,1,13)
f(j,1,14)=f(j,1,8)
f(j,1,11)=f(j,1,9)

dens_m1bc=0.0
dens_m2bc=0.0
dens_m3bc=0.0

do l=0,14
dens_m1bc=dens_m1bc+f(j,1,l)*c(1,1)
dens_m2bc=dens_m2bc+f(j,1,l)*c(1,2)
dens_m3bc=dens_m3bc+f(j,1,l)*c(1,3)
enddo

f(j,1,7)=f(j,1,7)-0.25*(dens_m1bc*e(7,1)+dens_m2bc*e(7,2)+
& dens_m3bc*e(7,3))
f(j,1,10)=f(j,1,10)-0.25*(dens_m1bc*e(10,1)+dens_m2bc*
& e(10,2)+dens_m3bc*e(10,3))
f(j,1,14)=f(j,1,14)-0.25*(dens_m1bc*e(14,1)+dens_m2bc*
& e(14,2)+dens_m3bc*e(14,3))
f(j,1,11)=f(j,1,11)-0.25*(dens_m1bc*e(11,1)+dens_m2bc*
& e(11,2)+dens_m3bc*e(11,3))

enddo

```

```

c-----
c      Outside Wall (14 - 10)
c-----
do j=1,nj

f(j,nk,2)=f(j,nk,4)
f(j,nk,8)=f(j,nk,14)
f(j,nk,9)=f(j,nk,11)
f(j,nk,12)=f(j,nk,10)
f(j,nk,13)=f(j,nk,7)

dens_m1bc=0.0
dens_m2bc=0.0
dens_m3bc=0.0

do l=0,14

```



```

dens_m1bc=dens_m1bc+f(j,nk,1)*c(1,1)
dens_m2bc=dens_m2bc+f(j,nk,1)*c(1,2)
dens_m3bc=dens_m3bc+f(j,nk,1)*c(1,3)
enddo

f(j,nk,9)=f(j,nk,9)-0.25*(dens_m1bc*e(9,1)+dens_m2bc*e(9,2)+
& dens_m3bc*e(9,3))
f(j,nk,8)=f(j,nk,8)-0.25*(dens_m1bc*e(8,1)+dens_m2bc*
& e(8,2)+dens_m3bc*e(8,3))
f(j,nk,12)=f(j,nk,12)-0.25*(dens_m1bc*e(12,1)+dens_m2bc*
& e(12,2)+dens_m3bc*e(12,3))
f(j,nk,13)=f(j,nk,13)-0.25*(dens_m1bc*e(13,1)+dens_m2bc*
& e(13,2)+dens_m3bc*e(13,3))

enddo

c-----
c Upper Wall (9 - 10)
c-----

do k=1,nk

f(nj,k,6)=f(nj,k,5)
f(nj,k,14)=f(nj,k,8)
f(nj,k,11)=f(nj,k,9)
f(nj,k,12)=f(nj,k,10)
f(nj,k,13)=f(nj,k,7)

dens_m1bc=0.0
dens_m2bc=0.0
dens_m3bc=0.0

do l=0,14
dens_m1bc=dens_m1bc+f(nj,k,l)*c(1,1)
dens_m2bc=dens_m2bc+f(nj,k,l)*c(1,2)
dens_m3bc=dens_m3bc+f(nj,k,l)*c(1,3)
enddo

f(nj,k,14)=f(nj,k,14)-0.25*(dens_m1bc*e(14,1)+dens_m2bc*
& e(14,2)+dens_m3bc*e(14,3))
f(nj,k,11)=f(nj,k,11)-0.25*(dens_m1bc*e(11,1)+dens_m2bc*
& e(11,2)+dens_m3bc*e(11,3))
f(nj,k,12)=f(nj,k,12)-0.25*(dens_m1bc*e(12,1)+dens_m2bc*
& e(12,2)+dens_m3bc*e(12,3))
f(nj,k,13)=f(nj,k,13)-0.25*(dens_m1bc*e(13,1)+dens_m2bc*
& e(13,2)+dens_m3bc*e(13,3))

enddo

c-----
c Concave Edges
c-----

c-----
c C E 14
c-----

f(1,nk,2)=f(1,nk,4)
f(1,nk,5)=f(1,nk,6)

f(1,nk,7)=0.5*(fp(1,nk,7)+fp(1,nk,13))

```

```

f(1,nk,13)=f(1,nk,7)

f(1,nk,10)=0.5*(fp(1,nk,10)+fp(1,nk,12))
f(1,nk,12)=f(1,nk,10)

f(1,nk,9)=f(1,nk,11)

f(1,nk,8)=f(1,nk,14)


dens_m1bc=0.0
dens_m2bc=0.0
dens_m3bc=0.0

do l=0,14
  dens_m1bc=dens_m1bc+f(1,nk,l)*c(1,1)
  dens_m2bc=dens_m2bc+f(1,nk,l)*c(1,2)
  dens_m3bc=dens_m3bc+f(1,nk,l)*c(1,3)
enddo

f(1,nk,9)=f(1,nk,9)-0.25*(dens_m1bc*e(9,1)+dens_m2bc*e(9,2)+
& dens_m3bc*e(9,3))
f(1,nk,8)=f(1,nk,8)-0.25*(dens_m1bc*e(8,1)+dens_m2bc*
& e(8,2)+dens_m3bc*e(8,3))

c-----
c          C E    13
c-----
f(1,1,4)=f(1,1,2)
f(1,1,5)=f(1,1,6)

f(1,1,10)=f(1,1,12)

f(1,1,7)=f(1,1,13)

f(1,1,11)=0.5*(fp(1,1,11)+fp(1,1,9))
f(1,1,9)=f(1,1,11)

f(1,1,14)=0.5*(fp(1,1,14)+fp(1,1,8))
f(1,1,8)=f(1,1,14)


dens_m1bc=0.0
dens_m2bc=0.0
dens_m3bc=0.0

do l=0,14
  dens_m1bc=dens_m1bc+f(1,1,l)*c(1,1)
  dens_m2bc=dens_m2bc+f(1,1,l)*c(1,2)
  dens_m3bc=dens_m3bc+f(1,1,l)*c(1,3)
enddo

f(1,1,7)=f(1,1,7)-0.25*(dens_m1bc*e(7,1)+dens_m2bc*e(7,2)+
& dens_m3bc*e(7,3))
f(1,1,10)=f(1,1,10)-0.25*(dens_m1bc*e(10,1)+dens_m2bc*
& e(10,2)+dens_m3bc*e(10,3))

c-----
c          C E    10
c-----

```

```

c-----
      f(nj,nk,2)=f(nj,nk,4)
      f(nj,nk,6)=f(nj,nk,5)

      f(nj,nk,13)=f(nj,nk,7)

      f(nj,nk,12)=f(nj,nk,10)

      f(nj,nk,11)=0.5*(fp(nj,nk,11)+fp(nj,nk,9))
      f(nj,nk,9)=f(nj,nk,11)

      f(nj,nk,14)=0.5*(fp(nj,nk,14)+fp(nj,nk,8))
      f(nj,nk,8)=f(nj,nk,14)

      dens_m1bc=0.0
      dens_m2bc=0.0
      dens_m3bc=0.0

      do l=0,14
        dens_m1bc=dens_m1bc+f(nj,nk,l)*c(l,1)
        dens_m2bc=dens_m2bc+f(nj,nk,l)*c(l,2)
        dens_m3bc=dens_m3bc+f(nj,nk,l)*c(l,3)
      enddo

      f(nj,nk,13)=f(nj,nk,13)-0.25*(dens_m1bc*e(13,1)+dens_m2bc*e(
&      13,2)+dens_m3bc*e(13,3))
      f(nj,nk,12)=f(nj,nk,12)-0.25*(dens_m1bc*e(12,1)+dens_m2bc*
&      e(12,2)+dens_m3bc*e(12,3))

c-----
c              C E  9
c-----
      f(nj,1,4)=f(nj,1,2)
      f(nj,1,6)=f(nj,1,5)

      f(nj,1,12)=0.5*(fp(nj,1,12)+fp(nj,1,10))
      f(nj,1,10)=f(nj,1,12)

      f(nj,1,13)=0.5*(fp(nj,1,13)+fp(nj,1,7))
      f(nj,1,7)=f(nj,1,13)

      f(nj,1,11)=f(nj,1,9)

      f(nj,1,14)=f(nj,1,8)

      dens_m1bc=0.0
      dens_m2bc=0.0
      dens_m3bc=0.0

      do l=0,14
        dens_m1bc=dens_m1bc+f(nj,1,l)*c(l,1)
        dens_m2bc=dens_m2bc+f(nj,1,l)*c(l,2)
        dens_m3bc=dens_m3bc+f(nj,1,l)*c(l,3)
      enddo

      f(nj,1,11)=f(nj,1,11)-0.25*(dens_m1bc*e(11,1)+dens_m2bc*e(11,2)+
&      dens_m3bc*e(11,3))
      f(nj,1,14)=f(nj,1,14)-0.25*(dens_m1bc*e(14,1)+dens_m2bc*

```

```

&          e(14,2)+dens_m3bc*e(14,3))

      numer=numer+1
c-----
c  END TIME INTEGRATION
c-----
      enddo  ! next m
c-----
c  OUTPUT DATA
c-----
      do j=1,nj
        do k=1,nk
          u1=u(j,k,1)
          u2=u(j,k,2)
          u3=u(j,k,3)
          write(3,100) x(j,k,1),x(j,k,2),u1,u2,u3,dens(j,k)
        enddo
      enddo

      write(3,*) NUMER-1, TAU, G, VIS

close(3)

Print*, 'CHECK FILE!!'
Pause
Print*, 'Do you need more iterations? (Y/N)'
Read*, ans

      if (ans.eq.'YES') then
        Print*, 'Enter new number of iterations:'
        Read*, nit
        nm=nit
        open(3)
        goto 55
      else
        stop
      endif

close(3)

100  format(6(1x,f11.7))

c-----
c  END OF PROGRAM
c-----
      stop
      end

```

